

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский университет «МЭИ»

На правах рукописи



Ефременко Дмитрий Сергеевич

Технология быстрой интерпретации сигналов
оптико-электронных систем для определения
параметров атмосферы и твердотельных мишеней

Специальность 05.11.07 – Оптические и оптико-электронные приборы и
комплексы

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
доктора технических наук

Научный консультант:
доктор технических наук,
проф. Будаков В.П.

Москва 2017

Содержание

Введение	4
1 Аналитический обзор	23
1.1 Дистанционное зондирование Земли из космоса с помощью современных ОЭС .	23
1.2 Моделирование измеряемого сигнала в полосе Хюггинса	28
1.3 Моделирование сигнала, регистрируемого ОЭС ОДЗ, средствами уравнения переноса	34
1.4 Линеаризация алгоритмов решения уравнения переноса	40
1.5 Извлечение информации о содержании озона из полосы Хаггинса	44
1.6 Учет горизонтально-неоднородной облачности в задачах дистанционного зондирования	53
1.7 Влияние различных факторов на точность моделирования сигнала отраженного излучения в полосе Хюггинса	62
Результаты Главы 1	62
2 Решение монохроматической задачи	64
2.1 Существование и единственность решения дискретизованного уравнения переноса	64
2.2 Малоугловая модификация метода дискретных ординат в псевдосферической модели атмосферы	78
2.3 Оптимизация метода дискретных ординат	94
2.4 Линеаризация метода дискретных ординат с малоугловой модификацией	104
2.5 Анализ аналитических способов ускорения метода дискретных ординат	111
Результаты Главы 2	118
3 Моделирование мультиспектрального сигнала	119
3.1 Иерархия циклов вызова подпрограммы решения уравнения переноса	119
3.2 Методология снижения размерности исходных данных для расчета спектра . .	121
3.3 Модель переноса излучения со снижением размерности исходных данных	124
3.4 Методы локального линейного вложения	127
3.5 Дискретно-ортогональные преобразования	131
3.6 Сравнительный анализ методов снижения размерности	133
3.7 Качественная интерпретация метода	138
3.8 Оптимизация расчета спектра в случае присутствия облака	139
3.9 Влияние аппаратно-программных средств на скорость решения уравнения переноса излучения для плоской геометрии среды	150
Результаты Главы 3	172
4 Стохастический подход	174

4.1	Методы учета горизонтальной неоднородности среды	174
4.2	Стохастическая теория переноса излучения для модели разорванной облачности	176
4.3	Верификация стохастической модели	196
4.4	Приближенные модели переноса при наличии разорванной облачности	207
4.5	Численное сравнение моделей	218
	Результаты Главы 4	226
5	Многомерная модель	228
5.1	Предварительные замечания	228
5.2	Анализ метода коротких характеристик	229
5.3	Разностные схемы в методе коротких характеристик	233
5.4	Численный анализ интерполяционных схем	238
5.5	Решение прямой задачи: VSHDOM	247
5.6	Линеаризация SHDOM	263
5.7	Численные расчеты	275
	Результаты Главы 5	283
6	Обратные задачи дистанционного зондирования	285
6.1	Решение нелинейных обратных задач	285
6.2	Использование одномерной модели переноса излучения для интерпретации измерений GOME 2	290
6.3	Регрессионные модели для определения высоты вулканических шлейфов	292
6.4	Определение концентрации озона и параметров облака на основе стохастической модели	308
	Результаты Главы 6	325
7	Использование методов и подходов теории оптического переноса в решении обратных задач электронной спектроскопии	327
7.1	Обработка измерений упруго отраженных электронов	329
7.2	Определение дифференциальных сечений неупругого рассеяния из спектров характеристических потерь энергии	333
	Результаты Главы 7	337
	Заключение	338
	Приложения	341
	Приложение А. Базисные интерполяционные функции	341
	Приложение Б. Разностные схемы нулевого порядка	342
	Приложение В. Вывод соотношений для разностной схемы первого порядка	345
	Приложение Г. Доказательство ортогональности для \mathbf{P}_{nm}	347
	Приложение Д. Регуляризация решения	349
	Приложение Е. Снижение размерности спектральных данных	350
	Благодарности	353
	Список использованных источников	353

Введение

Актуальность работы

Оптико-электронные системы (ОЭС) активно используются для дистанционного измерения различных физических параметров при решении экологических и технологических проблем. С помощью ОЭС реализуются два важнейших для науки и индустрии направления: оптическое дистанционное зондирование (ОДЗ) Земли из космоса и анализ твердотельных многослойных мишеней с нанометровым разрешением. Первое направление позволяет осуществлять глобальный мониторинг состава атмосферы Земли. Для изучения энергетического баланса планеты и устойчивости климатической системы (*Б.М.Смирнов*) необходима информация о содержании, так называемых, малых газовых компонент (trace gases), концентрация которых в атмосфере очень мала (доли процента); однако из-за особенностей спектра поглощения их роль в переносе теплового излучения и баланса энергии исключительно велика. Так, например, слой озона толщиной всего 3 мм при нормальном давлении ослабляет проходящий через него луч с длиной волны 255,3 нм в 10^{50} раз (*А.Х. Хрговиц*). Второе направление, связанное с диагностикой поверхности твердого тела, реализуется в рамках методов электронной спектроскопии и сопровождает развитие нанотехнологий. С их помощью решается множество материаловедческих задач, связанных с первой стенкой термоядерного реактора, водородным охрупчиванием материалов, повышением износостойкости конструкционных материалов и неразрушающим контролем напыленных слоев нано- и субнанометровой толщины.

Значительный прогресс в средствах регистрации (повышение пространственного разрешения и соотношения сигнал-шум) и передачи (каналы спутниковой связи с большой пропускной способностью) излучения открывают перспективы создания новых ОЭС ОДЗ атмосферы, на порядок более информативных, чем сегодняшние системы. В рамках проекта Copernicus (Global Monitoring for Environment and Security) Европейское космическое агентство (ESA) реализует миссии Sentinel-5 Precursor (2017), Sentinel-4 (2019) и Sentinel-5 (2021), посвященные, в частности, измерению малых газовых компонент (включая O₃, NO₂ и SO₂) и параметров облаков. Новое поколение инструментов измерения спектров солнечного излучения, отраженного атмосферой, TROPOMI (The TROPospheric Monitoring Instrument) в проектах Sentinel-5 Precursor и Sentinel 5 обладает высоким пространственным разрешением

(7 км × 7 км) (для сравнения, у инструмента GOME-2 – 80 км × 40 км). Как следствие, объем получаемых данных возрастает на два порядка. Причем обработка данных level 0 (данные, поступающие непосредственно от устройства) → level 2 (геофизические параметры, например, общее содержание озона) должна осуществляться за 1-2 часа с момента передачи измерений на Землю. Поэтому к методам расшифровки измеряемых спектров предъявляются беспрецедентные требования по скорости счета ($\sim 10^7$ наземных пикселей за сутки; для сравнения у GOSAT $\sim 10^3$). Дистанционное зондирование рассматривается в контексте понятий «супервычисления» (*Т.А.Сушкевич, Г.И.Марчук*) и «большие данные» (big data), так как совокупность обрабатываемой информации удовлетворяет критерию 3V (volume, velocity, variety) – объем, скорость и разнообразие.

Спутниковые системы ОДЗ регистрируют отраженное системой атмосферы с подстилающей поверхностью излучение, а потому измерения параметров атмосферы являются косвенными и определяются в рамках решения обратной задачи. Определение содержания газовых компонент основывается на обращении уравнения переноса излучения (УПИ) по результатам измерения яркости отраженного излучения при заданном уровне солнечного освещения. Фундаментальный вклад в развитие теории переноса излучения и технологию расшифровки спектров отраженного излучения внесли В.А.Амбарцумян, В.В.Соболев, В.В.Иванов, Г.В.Розенберг, Т.А.Гермогенова, Т.А.Сушкевич, В.Е.Зуев, Ю.М.Тимофеев, И.Н.Мельникова, Т.Б.Журавлева и др. Как правильно, обратная задача сводится к минимизации функции Тихонова. Одной из проблем интерпретации сигнала гиперспектральных приборов при решении обратной задачи является эффективный расчет матрицы Якоби (весовых функций), т.е. производных сигнала по искомым параметрам. Матрица Якоби необходима для локальной линеаризации задачи и построения обратного оператора. Как правило, соответствующие линеаризованные модели на порядок медленнее нелинеаризованных, однако превосходят методы, основанные на конечных разностях, по скорости и точности вычислений (*М.Бокс, Й.Ландграф, Р.Спёрр, О.В.Постыляков*). Несмотря на многообразие существующих радиационных кодов, большинство из них не позволяет рассчитывать матрицу Якоби. С учетом отношения «сигнал-шум» современных ОЭС ОДЗ $\sim 10^3$ при определении малых газовых точность моделирования измеряемого сигнала средствами УПИ должна быть не хуже 0.1% при времени счета монохроматической задачи не превышающей 0.0001 секунд (*Д.Лойола*). Существующие операционные алгоритмы не удовлетворяют этим жестким критериям, в частности, из-за вычислительных сложностей, возникающих при наличии в атмосфере аэрозоля

грубой фракции (Ю.А. Пхалагов, М.А.Свириденков) и крупных по сравнению с длиной волны капель с облаке, рассеяние на которых сильно анизотропно.

При определении концентрации озона из полосы Хаггинса (*Huggins band*) (320–360 нм), расчет функции яркости затрудняет то обстоятельство, что на спектр отраженного излучения сильное влияние оказывают облака. Для аккуратного решения обратной задачи необходимо принимать во внимание горизонтальную неоднородность среды, обусловленную присутствием облаков в поле зрения инструмента. Большинство операционных алгоритмов определения по-слойного состава атмосферы основаны на приближении независимых пикселей (Independent pixel approximation (IPA)), когда для каждого пикселя решается одномерная задача. Однако при малой горизонтальной протяженности облака ошибка при моделировании сигнала, измеряемого ОЭС ОДЗ, может достигать 30 % из-за влияния горизонтальной неоднородности среды (А.А.Кохановский). Моделирование сигнала от неоднородных сред в рамках трехмерной модели переноса излучения изучалось в работах Т.А.Сушкевич, А.Маршака, Э. Девиса и К.Ф. Эванса. Однако на практике решить обратную трехмерную граничную задачу для уравнения переноса трудно из-за её плохой обусловленности, трудоемкости вычислений, неполноте данных об оптических свойствах облака и отсутствии линеаризованной 3D-модели. Альтернативный подход заключается в расчете сигнала при неоднородной облачности на основе стохастических моделей переноса излучения, развитых в работах О.А. Авасте, Г.М.Вайникко, Л.С. Долина, Т.Б. Журавлевой, Г.А.Титова, Г.Помранинга, Б.А.Каргина, С.М.Пригарина и Е.И.Касьянова. В рамках этого подхода устанавливается взаимосвязь между статистическими характеристиками полей облачности и радиации. Постановка стохастической задачи позволяет уйти от решения исходной трехмерной задачи, но учесть влияние разорванной облачности. Последовательный метод решения стохастической задачи (метод замкнутых уравнений) был развит Г.А.Титовым и доведен «до числа» методом Монте Карло (Г.И.Марчук, Г.А. Михайлов), однако не был воплощен в операционных алгоритмах из-за невысокой скорости счета по сравнению с одномерными моделями и вычислительных сложностей при расчете матрицы Якоби. Поэтому для нового поколения инструментов ОДЗ требуется создание метода определения профилей концентрации атмосферных газов в условиях стохастической облачности.

Говоря о диагностике состава твердотельных мишеней, отметим значительный прогресс в средствах регистрации спектров отраженных электронов (В.П.Афанасьев, М.Вос). Высокое энергетическое разрешение (0.4 эВ при энергии зондирующего электрона 40 кэВ) реализуется на серийно выпускаемом оборудовании по электронной спектроскопии и позволяет

детектировать связанный водород в конструкционных материалах. А измерение спектров в интервале углов визирования при разных энергиях зондирующих электронов позволяет осуществить послойный анализ твердотельных мишеней. Одной из проблем количественной электронной спектроскопии являются отсутствие надежных данных по дифференциальным сечениям неупругого рассеяния. Для их определения из спектров характеристических потерь энергии требуется метод быстрого и точного моделирования потока отраженных электронов. Однако большинство программ интерпретации спектров основаны на методе Монте-Карло (*В.Вернер*), который требует значительных затрат времени для накопления приемлемой статистики, или транспортном приближении, ошибка которого может достигать 50% при расчете потоков отраженных электронов. Для получения количественно правильной информации вводят поправочные коэффициенты и *ad-hoc* гипотезы, которые, однако, не систематизируются в последовательную методологию, и часто приводят результатам, лишенным физического смысла (*С.Тугаард*). Линеаризованные методы обращения с помощью матрицы Якоби до сих пор не получили распространение в количественной электронной спектроскопии. Обратная задача решается, как правило, методом подбора или методом глобальной оптимизации, для чего необходимо многократное решение прямой задачи с помощью быстрых методов. Усложняет расшифровку спектров необходимость рассмотрения поверхности мишени как слоисто неоднородного объекта с различными законами потерь энергии в приповерхностных слоях и удаленном от поверхности однородном массиве мишени из-за влияния поверхностных плазмонов. Для обработки спектров и решения соответствующей обратной задачи требуются быстрые линеаризованные модели переноса частиц в твердом теле, которые, однако, до сих пор не были созданы.

Резюмируя введение, можно сказать, что сегодня технические характеристики современных оптико-электронных систем превосходят методы интерпретации данных, получаемых с их помощью. Как следствие, точность и объем получаемой информации не позволяют обработать её в разумные сроки. Поэтому актуальной задачей является устранение дисбаланса между инструментом и методом. Для анализа данных, получаемых с помощью современных оптико-электронных систем, требуется новая технология интерпретации сигнала как для определения малых газовых концентраций в атмосфере, так и для послойного анализа поверхности твердотельных мишеней. Диссертация написана автором по материалам его работы в ФГБОУ ВО «НИУ «МЭИ» в научных группах профессора В.П. Афанасьева и профессора В.П. Будака, а также в Институте дистанционного зондирования (Institut für Methodik der Fernerkundung) Германского центра авиации и космонавтики (Deutsches Zent-

rum für Luft- und Raumfahrt (DLR e.V.)¹) в группе профессора Т.Траутмана (подразделение атмосферных процессоров).

Цели и основные задачи работы

Целью работы является создание технологии быстрой интерпретации сигнала оптико-электронных систем дистанционного зондирования для определения концентрации малых газовых компонент атмосферы в режиме реального времени при неоднородной облачности, а также послыйного состава твердотельных мишеней по спектрам отраженных электронов.

Реализация намеченной цели требует решения следующих задач:

1. Анализ методов решения уравнения переноса излучения и их обобщение на основе метода матричной экспоненты; построение аналитической линейаризованной модели для расчета матрицы Якоби.
2. Исследование возможностей ускорения моделирования отраженной яркости в задачах определения малых газовых концентраций, в том числе с помощью мультипроцессорных и гетерогенных вычислительных систем.
3. Создание методики быстрого моделирования измеряемого спектра рассеянного излучения на основе методов снижения размерности оптических данных, а также построение соответствующей линейаризованной модели для расчета производных от яркости по концентрации малых газовых компонент.
4. Моделирование сигнала ОЭС ОДЗ для атмосферы с разорванной облачностью на основе стохастической модели переноса излучения, а также валидация стохастической модели на основе численного решения трехмерного уравнения переноса.
5. Создание операционного алгоритма расчета сигнала ОЭС ОДЗ для атмосферы с разорванной облачностью на основе квази-одномерных моделей переноса излучения.
6. Разработка алгоритма расчета матрицы Якоби для яркости рассеянного излучения на основе линейаризации алгоритма решения трехмерного уравнения переноса.
7. Разработка метода моделирования потока упруго отраженных электронов на основе дискретизованного уравнения переноса излучения и построение линейаризованной модели для определения альбеда однократного рассеяния в поверхностном слое мишени.

¹<http://www.dlr.de/eoc>

Основные положения, выносимые на защиту

1. Построение прямой и линеаризованной моделей для расчета отраженной яркости в полосе Хаггинса и её производных по концентрациям малых газовых компонент, соответственно, в псевдо-сферической геометрии возможно без использования дополнительных предположений о степени вытянутости индикатрисы на основе правил цепного дифференцирования; причем аналитическое выделение анизотропной части функции яркости на основе малоуглового приближения в 2-3 раза уменьшает количество дискретных ординат, необходимое для достижения точности 0.05 % при расчете спектра в полосе Хаггинса.
2. Снижение размерности исходных оптических данных позволяет на порядок ускорить расчет спектра в полосе Хаггинса и частных производных яркости по концентрации озона; при сохранении двух главных компонент для массива оптических данных максимальная ошибка при расчете спектра не превышает 0.1% для рассмотренных атмосферных сценариев, используемых при восстановлении общего содержания озона.
3. При обработке спектральных данных level-1 \rightarrow level-2, основанной на малоугловой модификации метода сферических гармоник и аналитическом расчете матрицы Якоби, на GPU-устройствах процедурой, лимитирующей производительность всего алгоритма, является расчет собственных векторов и собственных значений; суммарное ускорение операционного алгоритма от развитых в диссертации методов превышает 300 раз.
4. Для моделирования сигнала в условиях стохастической облачности на основе метода замкнутых уравнений Г.А.Титова возможно получить матричное уравнение переноса для средней яркости и её статистических моментов, допускающее численное решение методом дискретных ординат с матричной экспонентой; скорость счета того же порядка, что и скорость моделирования сигнала в рамках одномерной модели. При этом модели внутреннего смешивания являются частным случаем стохастической модели нулевого порядка.
5. При использовании стохастической модели переноса излучения для разорванной облачности ошибки в определении общего содержания озона и эффективной оптической толщины неоднородного облака достигают минимума при одном и том же значении параметра регуляризации, что позволяет построить метод их совместного определения;

6. Использование в качестве эталонной модели не трехмерной, а стохастической, на порядок ускоряет процедуру параметризации горизонтально неоднородной атмосферы с помощью модели внутреннего смешивания; при этом точность модели внутреннего смешивания при расчете яркости отраженного излучения в 4 раза выше точности модели независимых пикселей;
7. Дифференциальная модель, основанная на приближении независимых пикселей, лишь частично убирает влияние неоднородного облака. Точность существующих операционных алгоритмов, основанных на одномерных моделях, может быть увеличена как минимум вдвое, если определять оптимальный параметр регуляризации и параметры облака, используя стохастическую модель переноса.

Научная новизна

1. Впервые малоугловая модификация метода сферических гармоник обобщена на случай псевдо-сферической модели среды и линеаризована для расчета матрицы Якоби от яркости рассеянного излучения. В отличие от традиционных радиационных кодов, метод не требует процедур усечения индикатрисы рассеяния и метода конечных разностей. В реальных задачах оптического дистанционного зондирования при расчете спектров в полосе Хаггинса выделение анизотропной части тела яркости приводит к меньшей ошибке, чем методы, основанные на усечении индикатрисы рассеяния, при одинаковом числе дискретных ординат.
2. Впервые реализована модель расчета спектров и соответствующей матрицы Якоби в полосе Хаггинса, основанная на снижении размерности исходных оптических данных. В отличие от многократного решения монохроматической задачи на основе мультипоточковой модели, рассчитывается спектральная поправка к двухпоточковому приближению в базе меньшей размерности; например, спектр из 88 точек в полосе Хаггинса рассчитывается с помощью пяти вызовов мультипоточковой модели, что обуславливает высокую скорость счета. При этом, максимальная ошибка не превышает 0.1 % при расчете яркости и 0.3 % для соответствующих производных по общему содержанию озона. В отличие от снижения размерности спектральных данных, ошибка предложенного метода не зависит от геометрии измерений.
3. Впервые алгоритм обработки спектров оптического излучения, основанный на решении уравнения переноса методом дискретных ординат и снижении размерности данных, рас-

параллелен с помощью интерфейса CUDA. На видеокарте Tesla K20 это привело к увеличению скорости счета на порядок. В отличие от существующих распараллеленных радиационных кодов, в предложенной реализации не используются библиотеки матричных вычислений, что позволяет оптимально организовать размещение массивов в памяти видеокарты.

4. Сформулированы модели внутреннего и внешнего смешивания на основе последовательного описания процесса переноса излучения в разорванной облачности и сведения стохастической модели первого порядка к стохастической модели нулевого порядка. На их основе осуществлена параметризация горизонтально неоднородных моделей облаков, используемых при определении малых газовых концентраций (озона и диоксида серы). Для определения подгоночных параметров используется стохастическая модель, а не трехмерная, что позволяет использовать метод в операционных алгоритмах.
5. Впервые на базе стохастической модели переноса излучения создан алгоритм совместного определения общего содержания и профиля озона с эффективными параметрами облачного слоя. В отличие от классических подходов, параметры облачного слоя определяются в рамках той же стохастической модели, что и концентрация озона, повышает стабильность и скорость работы алгоритма.
6. С помощью аналитического дифференцирования и на основе формализма сопряженных уравнений получена линеаризованная многомерная модель переноса излучения, позволяющая рассчитывать параметры Стокса, а также матрицу Якоби для решения обратных задач. Первый метод более точный, но требует на порядок больше памяти и обладает меньшей скоростью счета. Второй метод приводит к ошибке в производных порядка 5 % при оптической толще 2, однако скорость расчета матрицы Якоби сопоставима со скоростью решения прямой задачи.
7. Впервые линеаризованный радиационный код применен для решения обратных задач электронной спектроскопии по восстановлению сечений неупругого рассеяния электронов в твердотельных мишенях. В отличие от существующих методов обработки спектров, предложенный метод включает процедуру регуляризации и позволяет описывать спектры характеристических потерь энергии и спектры рентгеновской фотоэлектронной эмиссии в рамках единого подхода, не прибегая к введению дополнительных поправочных коэффициентов.

Практическая значимость диссертационной работы

- Проведенный анализ различных способов реализации алгоритма решения уравнения переноса позволил создать код, объединяющий большинство известных техник ускорения, оптимизированный для расчета спектра в полосе Хаггинса. В сочетании с использованием вычислений на графических процессорах скорость счета была увеличена в 300 раз по сравнению с классической реализацией метода дискретных ординат.
- Показана эффективность метода выделения анизотропной части на основе малоуглового приближения при расчете спектра для систем с сильно анизотропным рассеянием по сравнению с методами усечения индикатрисы рассеяния. Малоугловая модификация позволяет решать уравнение переноса без искажения индикатрисы рассеяния, что важно при решении обратных задач.
- Анализ влияния аппаратно-программных средств на скорость вычисления алгоритмов решения уравнения переноса излучения для плоской геометрии среды позволил выделить процедуры, лимитирующие производительность всего расчетного кода (это процедуры решения задачи на собственные значения), что позволяет выбрать направления дальнейшей оптимизации кода.
- Использование алгоритмов снижения размерности исходных данных позволяет на порядок ускорить расчет спектра при сохранении максимальной ошибки меньше 0.1%; при этом построение модели, основанной на методах уменьшения размерности, допускает использование различных техник перехода к новому базису, а процедура линеаризации при этом не меняется.
- Развита стохастическая теория открывает возможность постановки обратной задачи относительно статистических свойств облаков, причем основу программной реализации составляет хорошо апробированный алгоритм решения векторного уравнения переноса методом дискретных ординат с матричной экспонентой.
- Развитые многомерные алгоритмы решения уравнения переноса в сочетании со стохастической теорией могут быть использованы для апробации одномерных моделей переноса излучения в атмосферной оптике, а соответствующие линеаризованные модели позволяют проводить исследования чувствительности модели к входным параметрам. Линеаризованная трехмерная модель открывает перспективы решения трехмерных задач атмосферной оптики.

- Разработанные быстрые радиационные коды могут использоваться для расчета сигнала упруго отраженных электронов от многослойных систем. Возможность аналитического расчета матрицы Якоби по параметрам рассеивающей среды позволяет использовать градиентные методы для решения обратных задач электронной спектроскопии.

Достоверность результатов диссертационной работы

обеспечивается критической оценкой известных методов решения уравнения переноса и процедур линеаризации алгоритмов, строгостью математических преобразований при разработке алгоритмов расчета поля яркости и матрицы Якоби, сравнением результатов разработанных алгоритмов с результатами, полученными другими авторами (F. Evans, K. Stamnes, A.A. Kohkanovsky, R.J.D. Spurr, A. Doicu, V. Natraj, T. Trautmann) и на основе альтернативных методов и расчетных кодов DISORT, LIDORT, DOME, VDOM, SHDOM, и экспериментальной проверкой разработанных алгоритмов определения общего содержания озона и высоты диоксида серы на основе сравнения с результатами наземных наблюдений (NDACC) и с экспериментальными данными (IASI, CALIOP).

Личный вклад автора

Личный вклад автора заключается в выполнении основного объема исследований, включая разработку быстрых методов решения одномерного уравнения переноса излучения и расчета матрицы Якоби от функции яркости по параметрам рассеивающей среды; анализ точности и эффективности малоугловой модификации метода дискретных ординат в контексте обработки сигналов дистанционного зондирования в полосе Хюггинса; разработку системы обработки спектров отраженного солнечного излучения в ультрафиолетовом диапазоне для измерения общего содержания озона, профилей озона и диоксида серы; разработку алгоритма решения обратных задач при горизонтальной неоднородности рассеивающей среды на основе стохастических моделей первого и нулевого порядков; установлении ошибки приближения независимых пикселей при определении параметров облака и профилей озона; обобщение методов интерпретации оптического сигнала, отраженного атмосферой Земли, на задачи электронной спектроскопии; анализ и оформление результатов в виде публикаций и научных докладов. При непосредственном участии автора разрабатывалась линеаризованная и векторная многомерные модели. Все представленные в диссертации расчетные алгоритмы реализованы автором лично.

Апробация работы

Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на семинарах кафедры Общей физики и ядерного синтеза и кафедры Светотехники МЭИ(ТУ), на семинарах Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR e.V.), а также на следующих конференциях и симпозиумах: Special Detection Technique (Polarimetry) and Remote Sensing (2010, Киев, Украина), XX Ocean Optics Conference (2010, Alaska, USA), XI Международная научно-техническая конференция «Оптические методы исследования потоков (ОМИП-2011)» (2011, Москва, Россия), Международный симпозиум «Атмосферная радиация и динамика (МСАРД-2011)» (2011, Санкт-Петербург, Россия), XVII Международный симпозиум «Оптика атмосферы и океана. Физика атмосферы» (2011, Томск, Россия), VI International Conference «Current problems in optics of natural waters (ONW 2011)» (2011, St.-Petersburg, Russia), Eurotherm Conference No. 95: Computational Thermal Radiation in Participating Media IV (2012, Nancy, France), European Geosciences Union General Assembly (2012, 2017, Vienna, Austria), International Radiation Symposium (2012, Berlin, Germany), X всероссийская открытая ежегодная конференция «Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса» (2012, Москва, Россия), 7th International Symposium on Radiative Transfer (2013, Kusadasi, Turkey), Международный симпозиум «Атмосферная радиация и динамика (МСАРД-2013)» (2013, Санкт-Петербург, Россия), the 2nd Workshop on Studies of Atmospheric Aerosol Using Multi-Angle Spectropolarimetry (2013, Bern, Switzerland), Big data from space (2014, Frascati, Italy), The 40th COSPAR Scientific Assembly (2014, Moscow, Russia), AGU Joint Assembly (2015, Montreal, Canada), ATMOS 2015 (Crete, Greece), Big data from space (2016, Tenerife, Spain).

Соответствие содержания работы паспорту специальности 05.11.07

Из паспорта специальности: «Области исследований: 1. Исследование и разработка новых методов и процессов, которые могут быть положены в основу создания оптических и оптико-электронных приборов, систем и комплексов различного назначения. 2. Разработка, совершенствование и исследование характеристик приборов, систем и комплексов с использованием электромагнитного излучения оптического диапазона волн, предназначенных для решения задач: измерения геометрических и физических величин; исследования и контроля параметров различных сред и объектов, в том числе при решении технологических, экологических и биологических задач».

Измерения малых газовых компонент при дистанционном зондировании атмосферы являются косвенными, и искомые параметры определяются на основе обращения прямой задачи. Операционные алгоритмы, основанные на модели с плоскопараллельным горизонтально однородным облачным слоем, существенно ограничивают точность и возможности современных и будущих ОЭС ОДЗ. В работе предложена технология скоростной расшифровки оптического сигнала для определения параметров озонового слоя с учетом горизонтальной неоднородности рассеивающей среды, разработаны новые методы расчета сигналов оптических приборов дистанционного зондирования в контексте решения технологических и экологических задач, развиты методы интерпретации сигналов оптико-электронных диагностических систем для анализа компонентного состава твердотельных мишеней. Они основаны на эффективных алгоритмах решения уравнения переноса и их обращении, при этом фундаментальные проблемы в обосновании уравнения переноса в работе не затрагиваются.

Публикации

По результатам диссертационной работы опубликовано 70 печатных работ (с учетом материалов конференций), в том числе 33 в изданиях из перечня ВАК и включенных в международные базы цитирования Web of Science, Springer и SCOPUS:

1А. Афанасьев В.П., **Ефременко Д.С.**, Лубенченко А.В. Спектроскопия заряженных частиц, упругорассеянных плоскопараллельными слоями твердого тела // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2008. Т.5. С. 45–49;

2А. Афанасьев В.П., **Ефременко Д.С.**, Лубенченко А.В., Вент М.Р., Вос М. Спектроскопия резерфордовского рассеяния электронов – новый инструмент исследования твердых тел // Вестник МЭИ. 2009. №4. С.39–46;

3А. Афанасьев В.П., **Ефременко Д.С.**, Лубенченко А.В., Вос М., Вент М.Р. Восстановление сечений неупругого рассеяния из энергетических спектров отраженных атомных частиц // Известия РАН. Серия физическая. 2010. Т.74. № 2. С. 189–193;

— Afanasyev V.P., **Efremenko D.S.**, Lubenchenko A.V., Vos M. and Went M.R. Extraction of Cross-Sections of Inelastic Scattering from Energy Spectra of Reflected Atomic Particles // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2010. V.74. No. 2. P.170–174;

4А. Афанасьев В.П., Будак В.П., **Ефременко Д.С.**, Лубенченко А.В. Угловые распределения электронов и легких ионов, упруго отраженных от поверхности твердого тела // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2010. № 6. С. 34–39;

- Afanas'ev V.P., Budak V.P., **Efremenko D.S.**, Lubenchenko A.V. Angular Distributions of Electrons and Light Ions Elastically Reflected from a Solid Surface // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2010. V.4. No. 3. P. 488–493;
- 5A. Afanas'ev V.P., Afanas'ev M.V., Lubenchenko A.V., Batrakov A.A., Efremenko D.S., Vos M. Influence of multiple elastic scattering on the shape of the elastically scattered electron peak // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 2010. V. 177. P. 35–41;
- 6A. Афанасьев В.П., **Ефременко Д.С.**, Лубенченко А.В. Прямое численное восстановление сечений неупругого рассеяния из спектров REELS и ISS // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2011. № 4. С. 77–84;
- Afanas'ev V.P., **Efremenko D.S.**, Lubenchenko A.V. Direct Numerical Reconstruction of Inelastic Cross Sections from REELS and ISS Spectra // *Journal of Surface Investigation. X ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 2011. V. 5. No. 2. P. 375–382;
- 7A. Будак В.П., **Ефременко Д.С.**, Шагалов О.В. Сравнительный анализ алгоритмов решения векторного уравнения переноса излучения по эффективности для плоского слоя мутной среды // *Оптика атмосферы и океана*. 2011. Т. 24. № 12. С.1088–1098;
- 8A. Афанасьев В.П., **Ефременко Д.С.**, Лубенченко А.В. Определение границ применимости малоугловых методов решения уравнения переноса для спектроскопии упруго отраженных электронов // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2012. Т.76. №5. С.634–638;
- Afanas'ev V.P., **Efremenko D.S.**, Lubenchenko A.V. Determining the applicability boundaries of small-angle approximation to the radiative transfer equation for elastic peak electron spectroscopy // *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics*. 2012. V.76. No. 5. P. 565–569;
- 9A. Budak V.P., **Efremenko D.S.**, Shagalov O.V. Efficiency of algorithm for solution of vector radiative transfer equation in turbid medium slab // *Journal of Physics: Conference series*. 2012. V.369. P.012021;
- 10A. **Efremenko D.S.**, Doicu A., Loyola D., Trautmann T. Small-angle modification of the radiative transfer equation for a pseudo-spherical atmosphere // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2013. V.114. P.82–90;
- 11A. **Efremenko D.S.**, Doicu A., Loyola D., Trautmann T. Acceleration techniques for the discrete ordinate method // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2013. V.114. P.73–81;

- 12А. Будаков В.П., **Ефременко Д.С.**, Шагала О.В. Математическое моделирование сигналов оптико-электронной системы дистанционного зондирования из космоса при наличии разорванной облачности // *Известия высших учебных заведений. Физика*. 2012. Т.55. №9/2. С. 148–149;
- 13А. Doicu A., **Efremenko D.S.**, Trautmann T. A multi-dimensional vector spherical harmonics discrete ordinate method for atmospheric radiative transfer // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2013. V.118. P. 121–131;
- 14А. Doicu A., **Efremenko D.S.**, Trautmann T. An analysis of the short-characteristic method for the spherical harmonic discrete ordinate method (SHDOM) // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2013. V.119 P.114–127;
- 15А. Афанасьев В.П., Батраков А.А., **Ефременко Д.С.**, Иванов Д.А., Костановский И.А., Лубенченко А.В. Определение послойного состава твердого тела методом спектроскопии пиков упругоотраженных электронов с энергетическим сканированием // Вестник Московского энергетического института. 2012. № 5. С. 66-72;
- 16А. Афанасьев В.П., **Ефременко Д.С.**, Лубенченко А.В. Экспериментальная проверка методик расчета рассеяния света в мутных средах и определение альбедо однократного рассеяния на основе спектроскопии упруго отраженных электронов // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2013. №3. С. 97–102;
- Afanas'ev V.P., **Efremenko D.S.**, Lubenchenko A.V. Experimental verification of the technique for calculating light scattering in turbid media and determination of the single-scattering albedo based on the spectroscopy of elastically reflected electrons // *Journal of Surface Investigation*. 2013. V. 7. P. 285-289;
- 17А. Afanas'ev V.P., **Efremenko D.S.**, Lubenchenko A.V. On the application of the invariant embedding method and the radiative transfer equation codes for surface state analysis // Chapter in *Light Scattering Review 8* edited by A.A.Kokhanovsky. Springer. [Chapter 8](#). P. 363–423;
- 18А. Афанасьев В.П., **Ефременко Д.С.**, Иванов Д.А., Капля П.Н., Лубенченко А.В. Фотоэлектронная эмиссия для слоев конечной толщины. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2013. №4. С. 93–98;
- Afanas'ev V.P., **Efremenko D.S.**, Ivanov D.A., Kaplya P.S., Lubenchenko A.V. Photoelectron emission for layers of finite thickness // *Journal of Surface Investigation*. 2013. V.7. Issue 2. P. 382–387;

- 19A. **Efremenko D.S.**, Doicu A., Loyola D., Trautmann T. Accelerations of the discrete ordinate method for nadir viewing geometries. // *AIP Conf. Proc.* 2013. V.1531. P.55–58;
- 20A. **Efremenko D.S.**, Doicu A., Loyola D., Trautmann T. Optical property dimensionality reduction techniques for accelerated radiative transfer performance: Application to remote sensing total ozone retrievals // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2014. V.133. P.128–135;
- 21A. **Efremenko D.S.**, Loyola D.G., Spurr R.J.D., Doicu A. Acceleration of Radiative Transfer Model Calculations for the Retrieval of Trace Gases under Cloudy Conditions // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2014. V.135. P. 58–65;
- 22A. Doicu A., **Efremenko D.S.**, Loyola D., Trautmann T. Discrete ordinate method with matrix exponential for stochastic radiative transfer in broken clouds // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2014. V.138. P.1–16;
- 23A. Афанасьев В.П., **Ефременко Д.С.**, Иванов Д.А., Капля П.С., Лубенченко А.В. Влияние процессов многократного упругого рассеяния на угловые распределения рентгеновских фотоэлектронов // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2014. №1. С. 76–80;
- 24A. Doicu A., **Efremenko D.S.**, Loyola D., Trautmann T. Approximate models for broken clouds in stochastic radiative transfer theory // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2014. V.145. P.74–87;
- 25A. **Efremenko D.S.**, Loyola D., Doicu A., Spurr R.J.D. Multi-core-CPU and GPU-accelerated radiative transfer models based on the discrete ordinate method // *Computer Physics Communications*. 2014. V.185. P.3079–3089;
- 26A. Afanas'ev V.P., Golovina O.Y., Gryazev A.S., **Efremenko D.S.**, Kaplya P.S. Photoelectron Spectra of finite thickness layers // *Journal of Vacuum Science and Technology B: Nanotechnology and Microelectronics*. 2015. V.B33. P.03D101(1–6);
- 27A. Doicu A., Eremin Y., **Efremenko D.S.**, Trautmann T. Methods with discrete sources for electromagnetic scattering by large axisymmetric particles with extreme geometries // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2015. V. 164. P. 137–146;
- 28A. Afanas'ev V.P., **Efremenko D.S.**, Kaplya P.S. Analytical and numerical methods for computing electron partial intensities in the case of multilayer systems // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 2016. V. 210. P. 16–29.

29A. **Efremenko D.S.**, Schüssler O., Doicu A., Loyola D. A stochastic cloud model for cloud and ozone retrievals from UV measurements // [Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer](#). 2016. V.184. P.167-179.

30A. Afanas'ev V.P., Gryazev A.S., **Efremenko D.S.**, Kaplya P.S., Ridzel O.Y. Determination of atomic hydrogen in hydrocarbons by means of the reflected electron energy loss spectroscopy and the X-ray photoelectron spectroscopy // [Journal of Physics: Conference Series](#). 2016. V. 748. P. 012005 (1-8).

31A. Афанасьев В.П., Грязев А.С., **Ефременко Д.С.**, Капля П.С., Ляпунов Н.В. Восстановление дифференциальных сечений неупругого рассеяния на основе спектров рентгеновской фотоэлектронной эмиссии// [Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования](#). 2016. №9. С.27–32.

32A. Afanas'ev V.P., Gryazev A.S., **Efremenko D.S.**, Kaplya P.S. Differential inverse inelastic mean free path and differential surface excitation probability retrieval from electron energy loss spectra // [Vacuum](#). 2017. V.136. P.146–155.

33A. **Efremenko D.S.**, Molina Garcia V., Gimeno Garcia S., Doicu A. A review of the matrix-exponential formalism in radiative transfer // [Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer](#) [accepted] doi:10.1016/j.jqsrt.2017.02.015

Основные положения диссертации полностью представлены в опубликованных работах.

Общая структура работы

Диссертационная работа состоит из введения, семи глав, заключения и шести приложений. В конце представлен список цитируемой литературы из 415 наименований. Общий объем работы составляет 388 страниц, она содержит 153 иллюстраций и 28 таблиц.

В настоящем введении сформулированы актуальность, цель работы, практическая значимость, приведены основные публикации по теме диссертации, а также описана общая структура работы.

В **первой главе** описаны физические основы дистанционного зондирования атмосферы с целью определения содержания озона, приведены спектры, измеренные инструментом GOME. Сформулированы прямая и обратная задачи дистанционного зондирования на языке уравнения переноса излучения. Перечислены основные методы решения уравнения переноса, а также отмечена принципиальная необходимость выделения анизотропной части излучения и формулирования уравнения для гладкой компоненты решения. Описаны основные подходы к решению обратных задач атмосферной оптики. Показано, что алгоритмы обработки

спектров требуют линеаризованных моделей переноса излучения, в которых рассчитываются также частные производные от яркости по искомым параметрам. Приводится обзор методов построения линеаризованных моделей. Перечислены основные подходы к учету горизонтальной неоднородности среды, а также проанализированы преимущества и недостатки многомерных моделей переноса и приближенных моделей. **Вторая глава** диссертации посвящена методам ускорения алгоритмов решения одномерного уравнения переноса излучения в случае многослойной среды, а также их линеаризованным версиям. Ставится граничная задача уравнения переноса излучения для псевдо-сферической геометрии. Решение основано на аналитическом выделении анизотропной части тела яркости на основе малоуглового приближения. Приведены сравнения малоугловой модификации метода дискретных ординат с традиционными алгоритмами, основанными на усечении индикатрисы рассеяния (на delta-M методе и TMS-методе). Проанализированы следующие способы ускорения метода дискретных ординат: метод левых собственных векторов, телескопический метод и метод ложной ординаты. Описана процедура расчета матрицы Якоби для метода дискретных ординат с малоугловой модификацией. Сравнены два классических подхода к решению уравнения переноса в случае многослойной среды – метод глобальной матрицы и матрично-операторный метод – в случае расчета частных производных. Глава завершается анализом влияния аппаратно-программных средств на скорость решения уравнения переноса излучения для плоской геометрии среды. Приводится описание организации вычислений с помощью OpenMP и MPI. Также описана реализация алгоритма на платформе графических процессоров NVidia. В **третьей главе** рассматривается метод ускорения расчета спектров рассеянного излучения на основе алгоритмов снижения размерности исходных данных. Описана процедура линеаризации соответствующих моделей. После вывода основных соотношений и обоснования метода приведено описание конкретных реализаций алгоритмов снижения размерности: метода главных компонент, методов локального вложения и дискретно-ортогональных преобразований. Проводится сравнительный анализ этих методов по скорости расчета и точности получаемых решений на примере расчета спектра в полосе Хюггинса и соответствующих матриц Якоби. Приведенные результаты показывают, что при сохранении точности расчетов 0.1% с помощью сжатия исходных данных можно ускорить расчет спектров на порядок. Рассматриваются два метода ускорения расчета в модели независимых столбцов в присутствии облака. Обычно требуется два вызова прямой модели: один раз для чистого неба, второй раз для атмосферы с облаком. Первая методика оптимизации является численно точной. Она основана на сохранении временных массивов алгоритма (таких как массив собственных векторов и соб-

ственных значений) для случая ясного неба. При расчете спектра для атмосферы с облаком эти массивы используются для тех слоев, которые не изменились. Вторая методика основана на спектральной коррекции, рассчитанной на основе двухпоточкового приближения. Несмотря на то, что эта методика является приближенной, максимальная допускаемая ошибка в расчете спектра не превышает 0.1%. В **четвертой главе** развиты методы учета горизонтальной неоднородности среды, обусловленной облаками, при расчете спектров отраженного излучения. Излагается стохастическая теория переноса излучения. После математической постановки задачи выводится стохастическая модель n -ого порядка. Ей придан матричный вид, аналогичный векторному уравнению переноса с учетом поляризации. Показано, что основной проблемой построения модели является проблема замыкания системы уравнений. Для модели разорванной облачности модель n -ого порядка сводится к модели первого порядка, схожей с моделью Levermore-Pomraning. Решение полученного уравнения строится на основе метода дискретных ординат. Верификация модели основана на многократном решении многомерной задачи на основе SHDOM для набора реализаций распределения коэффициента экстинкции облака и последующего усреднения полученных решений. Приближенные модели учета неоднородности – модели внутреннего и внешнего смешивания – получены из стохастической модели; тем самым им дано математическое обоснование. Проводится сравнительный анализ между многомерными алгоритмами, стохастическим решением и приближенными моделями. Особое внимание уделяется вопросу практической применимости развитых алгоритмов для задач дистанционного зондирования. **Пятая глава** посвящена построению линеаризованной векторной теории переноса поляризованного излучения. Проанализированы различные реализации метода коротких характеристик. Показано, что разностные схемы могут быть оценены с точки зрения выполнения условий консервативности и согласованности модели, причем второе условие является более сильным. Проведено сравнение разностных схем высокого порядка со схемами, использующими адаптивные сетки. Скалярный алгоритм SHDOM обобщается на векторный случай с помощью системы обобщенных сферических функций. На основе разложения функции источников и вектора Стокса по этим функциям с учетом условия их ортогональности и полноты получены соотношения для коэффициентов разложения функции источников через коэффициенты разложения вектора Стокса. Использование совместного представления вектора Стокса в расчетных узлах решетки через дискретные ординаты и сферические функции позволяет, с одной стороны, использовать метод характеристик для расчета вектора Стокса, с другой, быстро рассчитывать функцию источников. Развитый алгоритм может быть реализован как на основе комплексной арифметики, так и с

помощью двух наборов функций, равных, соответственно, действительной и мнимой частям обобщенных сферических функций. Линеаризация трехмерного алгоритма построена на теории сопряженных операторов. Искомые частные производные выражаются через скалярное произведение решения сопряженной задачи и продифференцированной функции источников, что обеспечивает вычислительную эффективность расчетного кода. В **шестой главе** описано практическое применение развитых методов для решения обратных задач дистанционного зондирования. В частности, одномерные алгоритмы применены для интерпретации данных GOME-2 для определения общего содержания озона. На основе одномерных моделей построен регрессионный алгоритм определения высоты диоксида серы в атмосфере над очагами вулканической активности. Рассмотрено решение обратных задач с помощью стохастических моделей. Описан метод интерпретации спектров для совместного определения профиля озона и параметров облачности. В **седьмой главе** линеаризованные одномерные модели применены для интерпретации экспериментов электронной спектроскопии. Рассмотрены угловые распределения упруго отраженных электронов и спектры характеристических потерь энергии. Описана процедура извлечения информации о параметрах неупругого рассеяния.

Завершают диссертацию **Заключение**, содержащее основные полученные результаты и выводы, **список использованной литературы и приложения**.

ГЛАВА 1. Аналитический обзор

В этой Главе мы рассмотрим постановку прямой и обратных задач, подходы к их решению, имеющийся аналитический инструментарий и проблемы, которые необходимо решить для предстоящих миссий дистанционного зондирования.

1.1 Дистанционное зондирование Земли из космоса с помощью современных ОЭС

Дистанционное зондирование – это получение информации о физических параметрах объекта без непосредственного контакта с ним. Дистанционное зондирование как метод анализа используется для решения экологических и сельскохозяйственных задач, мониторинга Земли, предупреждения о чрезвычайных ситуациях, анализа структуры различных материалов, а также медицинской диагностики. Несмотря на многообразие методик и приложений, можно сформулировать единую принципиальную схему измерений. Некоторый сигнал от источника (будь то Солнце, рентгеновский источник [1–3], электронная пушка [4], лазер [5, 6]) взаимодействует с объектом (рассеивается, поглощается) и затем измеряется приемником. Строго говоря, простейшим примером пассивного дистанционного зондирования является визуальное наблюдение объекта при дневном освещении. В случае оптического дистанционного зондирования Земли таким источником является Солнце, чьё излучение взаимодействует с атмосферой и поверхностью Земли, а затем измеряется детектором, расположенным на поверхности Земли, самолете или спутнике. В последнем случае удастся организовать непрерывный и глобальный мониторинг атмосферы, который особенно востребован в контексте таких проблем как глобальное изменение климата, истощение озонового слоя, выбросы вулканической пыли, антропогенное загрязнение тропосферы и увеличение концентрации парниковых газов. После обнаружения так называемых озоновых дыр особое внимание уделяется вопросам сохранения озонового слоя и физико-химическим процессам, происходящим с ним. Во многих странах получили развитие программы дистанционного зондирования Земли из космоса.

Большое количество измерений в ультрафиолетовом, видимом и ближнем инфракрасном диапазонах было получено с помощью спектрометров GOME, GOME-2, OMI, SCIAMACHY и других инструментов. Спектрометр GOME (The Global Ozone Monitoring

Experiment) [7] делает измерения в диапазоне длин волн 240-790 нм, установлен на спутнике ERS-2 [8] и имеет спектральное разрешение 0.2-0.4 нм. Спектрометр GOME-2 является улучшенной версией GOME; установлен на спутнике MetOp. Спектральные характеристики схожи с GOME, однако GOME-2 точнее выполняет поляризационные измерения. Спектрометр SCIAMACHY [9,10] имел 8 детекторов в диапазоне 240-2380 нм, делал измерения в 7680 каналах. Первые 4 детектора, работающие в диапазоне 240-790 нм, были аналогичны GOME. Спектрометр был установлен на спутнике ENVISAT, контакт с которым был потерян 8 апреля 2012 года. Миссия GOSAT (Ibuki) направлена на измерение парниковых газов (CO₂, CH₄).

Новые миссии Sentinel-5 Precursor (модель спутника показана на рисунке 1.2), Sentinel-4 и Sentinel-5 обладают спектрометрами с беспрецедентными пространственным разрешением и точностью. Так, например, спектрометр Tropomi (TROPOspheric Monitoring Instrument), который будет установлен на спутнике Sentinel-5 Precursor, обладает высоким пространственным разрешением (7 км × 7 км против 80 км × 40 км GOME-2). На рисунке 1.1 показана зависимость отношения «сигнал-шум» TROPOMI от длины волны в диапазоне 320-500 нм. Отношение «сигнал-шум» спектрометра TROPOMI ~ 1000 и может достигать 2000 в ультрафиолетовом и видимом диапазонах. Характеристика инструмента TROPOMI приведена в Таблице 1.2. TROPOMI имеет 2D ПЗС-матрицу. Оптическая схема спроектирована таким образом, что спектральная информация разрешается вдоль одного измерения матрицы, а пространственная информация – по другому. Принципиальная схема измерений показана на рисунке 1.3. Сходный принцип работы имеют спектрометры UNVS/UNV, устанавливаемые на спутники Sentinel-5/4, соответственно. Заметим, что в отличие от измерений GOSAT, TROPOMI непрерывно «сканирует» поверхность Земли и обработке подлежат пиксели как с облаком, так и без облаков. Ширина полосы обхвата 2600 км. Высота орбиты Sentinel 5 Precursor 824 км. При этом угол зондирования меняется в пределах ±70. Поэтому требуется универсальный алгоритм, работающий при любой геометрии измерения, включая скользящие углы, соответствующие большой оптической толщине среды. На рисунке 1.4 показаны в одном масштабе размеры пикселей инструментов TROPOMI и GOME-2. Из Таблицы 1.1 видно, что объем данных с появлением новых спектрометров возрастает на 3-4 порядка. Данные, полученные с помощью TROPOMI с одной орбиты, имеют 1500000 спектров общим объемом 40 гигабайт. Программы интерпретации сигнала должны быть одновременно точными (т.е. соответствовать показателю «отношение сигнал-шум»), быстрыми для обработки больших

Таблица 1.1 — Сравнительная характеристика некоторых миссий дистанционного зондирования по измерению малых газовых концентраций

	GOSAT	GOME-2	TROPOMI(Sentinel 5 P)
Пространственное разрешение	10 км в диаметре	40 км×80 км	7 км×7 км
Режим сканирования	Разреженный	Непрерывный	Непрерывный
Количество пикселей в день	10^3	6×10^3	10^6

Таблица 1.2 — Характеристика инструмента TROPOMI

№ полосы	Диапазон, нм	Пространственное разрешение, км ²	Отношение сигнал-шум	Спектральное разрешение, нм
1	270-300	21×28	100	0.5
2	300-320	7×7	100-1000	0.5
3	310-405	7×7	1000-1500	0.55
4	405-495	7×7	1500	0.55
5	675-725	7×7	500	0.5
6	725-775	7×3.5	100-500	0.5
7	2305-2385	7×7	100-120	0.25

массивов данных в режиме реального времени и универсальными, т.е. применимыми как для оптически тонких, так и для оптически толстых сред.

Для получения информации о составе атмосферы необходимо провести интерпретацию спектра. Прямой задачей будем называть расчет спектра рассеянного излучения по известным параметрам атмосферы и подстилающей поверхности. Под обратной задачей будем понимать восстановление параметров атмосферы или подстилающей поверхности из спектров отраженного солнечного излучения. Обратные задачи, как правило, являются некорректными и плохо обусловленными [11, 12]. Надежным методом решения обратных задач является метод подбора (часто называемый «фиттингом» от англ. «*fit*» – примерять, подгонять), хорошо зарекомендовавший себя в области расшифровки спектров отраженных электронов твердотельными мишенями [13–17]. Однако массив данных, получаемых со спутников, столь огромен, что требует создания систем автоматической обработки информации, и, в частности, автономных программ решения обратных задач (не требующих участия человека в решении).

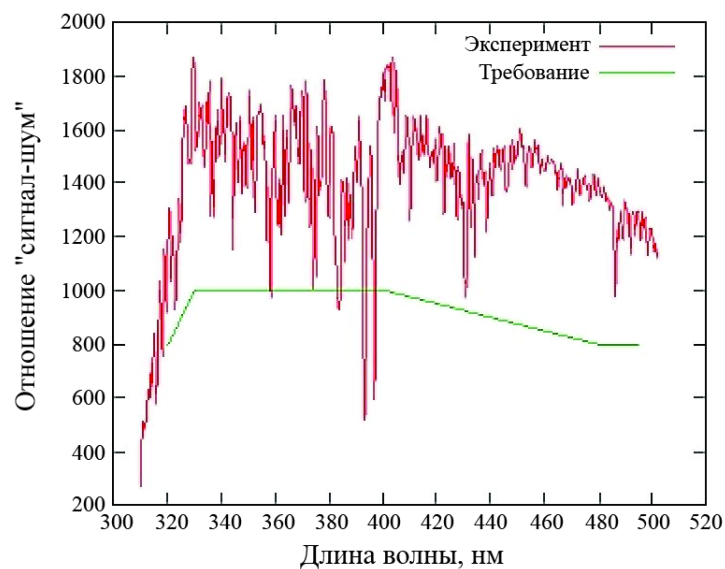


Рисунок 1.1 — Отношение «сигнал-шум» для инструмента TROPOMI (по материалам Голландского института космических исследований SRON). Материалы взяты с <https://directory.eoportal.org/web/eoportal/satellite-missions/c-missions/copernicus-sentinel-5p>



Рисунок 1.2 — Модель Sentinel 5 Precursor. Материалы взяты с <https://earth.esa.int/web/guest/missions/esa-future-missions/sentinel-5p>

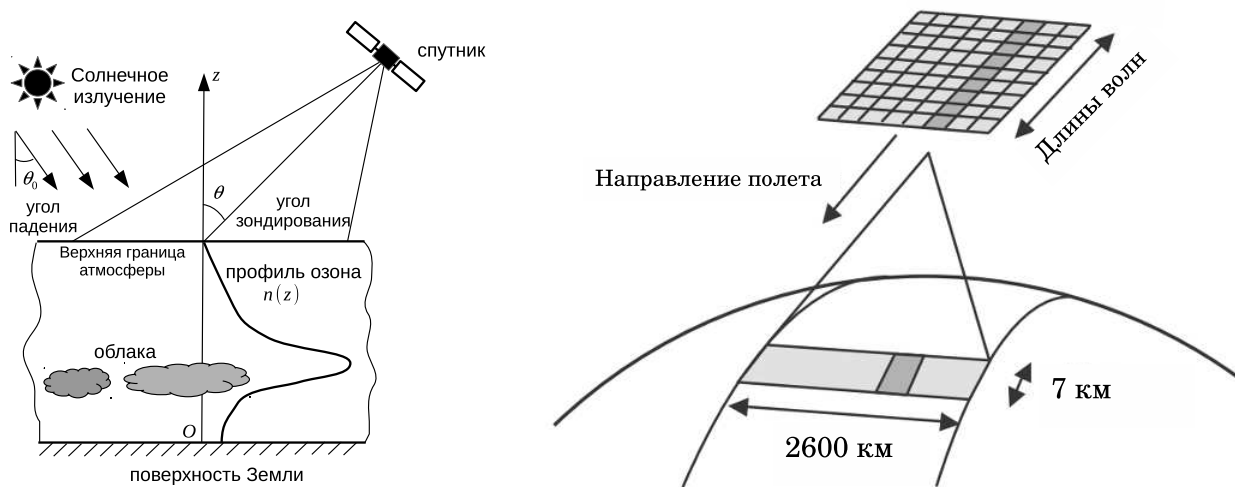


Рисунок 1.3 — Схема измерения профиля озона с помощью TROPOMI (Все наземные пиксели в полосе 2600 км измеряются одновременно). Материалы взяты с сайта <http://www.knmi.nl>.

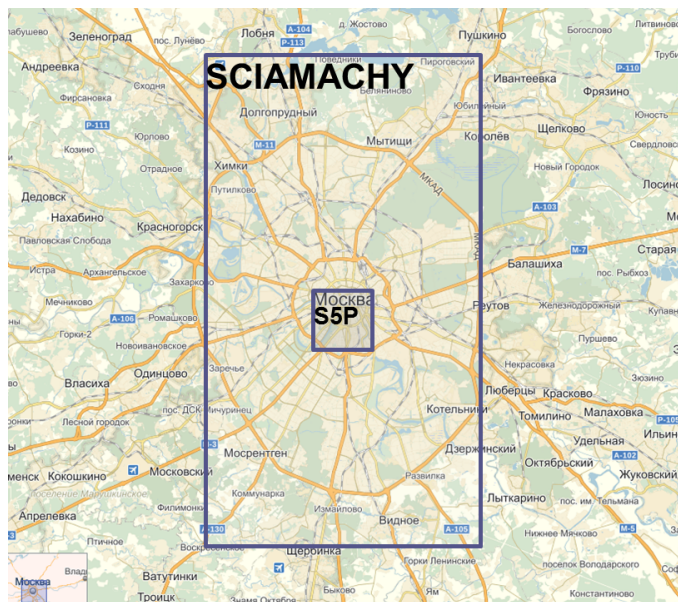


Рисунок 1.4 — Наземные пиксели SCIAMACHY и Sentinel 5 Precursor на карте Москвы.

1.2 Моделирование измеряемого сигнала в полосе Хюггинса

Для моделирования сигнала отраженного излучения рассмотрим процессы, происходящие с излучением в атмосфере.

1.2.1 Молекулярное поглощение

Наличие того или иного газа можно определять благодаря молекулярному поглощению. Молекулярное поглощение – квантовомеханический феномен, который заключается в переводе электрона молекулы газа с одного энергетического уровня на другой или с одного колебательного (вращательного) подуровня на другой за счет поглощения кванта света. По частоте, соответствующей такому переходу, можно судить о присутствии той или иной газовой компоненты. База данных HITRAN (High Resolution Transmission) [18] содержит спектроскопические параметры для 42 молекул и их изотопов. В ультра-фиолетовом и видимом спектральных диапазонах выделяют несколько полос поглощения озона [19]: полосу Хартли (*Hartley*) – 200–300 нм, полосу Хюггинса (*Huggins*) – 300–360 нм и полосу Шаппюи (*Chappuis*) – 450–700 нм. Данная работа сосредоточена в основном на создании алгоритмов интерпретации спектров в полосе Хюггинса. Отметим очень сильное поглощение излучения озоном в ультрафиолетовой области: как указано в [20], слой озона толщиной всего 3 мм при нормальном давлении ослабляет проходящий через него луч с длиной волны 255,3 нм в 10^{50} раз.

Полоса Хюггинса удобна тем, что влияние озона на спектр доминирует над влиянием других газов, в частности, NO₂ и SO₂. В [21] было проанализировано влияние NO₂ и SO₂ на определение общего содержания озона и показано, что возможная ошибка определения общего содержания озона при реалистичных концентрациях NO₂ не превышает 0.5 % при любых углах зондирования альбедо поверхности, однако может достигать 1 % в регионах с высоким содержанием NO₂. Влияние SO₂ и BrO пренебрежимо мало за исключением случаев вулканических извержений при концентрациях SO₂ более 100 единиц Добсона.

Сечение поглощения озона (коэффициента пропускания) неоднократно измерялось с 20-х годов XX века (из ранних работ можно выделить Ni Tsi-Ze и Choong Piau – 1933 год [22], Inn E. и Tanaka Y. – 1953 год [23]). На сегодняшний день существуют хорошо апробированные базы данных по сечениям поглощения озона в этом диапазоне [24, 25]. На рисунке 1.5 приведено сечение поглощения озона при температуре 300 K в спектральном интервале 325–335

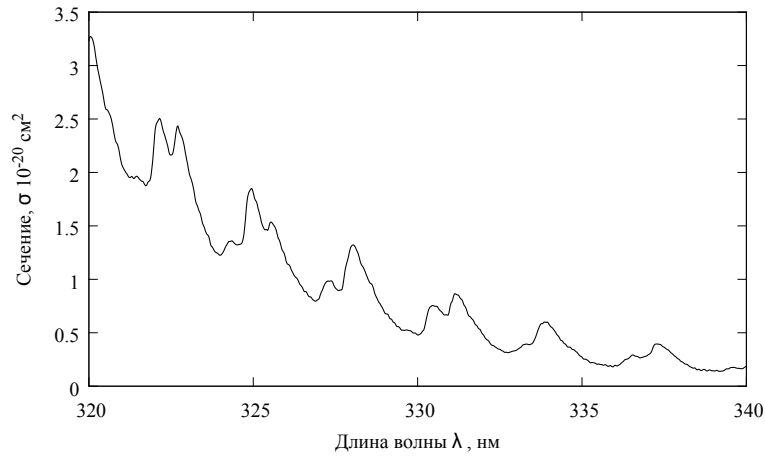


Рисунок 1.5 — Сечение поглощения для озона при температуре 300 K в спектральном интервале, соответствующем полосе Хартли-Хюггинса.

нм, соответствующем полосе Хюггинса, из [26]. Минимумы и максимумы достаточно резки, а потому полоса Хюггинса удобна для наблюдения и широко используется в озонometрии. Заметим, что ширина на половине высоты аппаратной функции TROPOMI ~ 0.59 нм в этом спектральном интервале, что много меньше ширины пиков у сечения поглощения. Поэтому при моделировании сигнала в полосе Хюггинса обычно используют сечения, уже свернутые с аппаратной функцией спектрометра. Это принципиально отличает расчет в ультрафиолетовом и видимом диапазонах от расчета в инфракрасной области, где сечения поглощения имеют много близких друг к другу линий, так что нельзя пользоваться «эффективными свернутыми» сечениями. К примеру, сигнал GOSAT для определения CO2 моделируют для $\sim 10^4$ спектральных точек.

На рисунке 1.6 приведен спектр отраженного солнечного излучения, измеренный спектрометром GOME-2. Измерения проводились 14/06/2007 на орбите № 3374. Спектр солнца (падающего излучения), показанный на рисунке 1.7, имеет сложную структуру, обусловленную линиями поглощения (фраунгоферовыми линиями) [27]. Поделив сигнал отраженного излучения на солнечный спектр, мы получаем спектры отраженного излучения, нормированные на единичный поток. Квазипериодическая структура нормированных спектров, показанных на рисунке 1.8, соответствует структуре сечения поглощения. Это говорит о доминирующем влиянии озона на спектр в рассматриваемом диапазоне длин волн по сравнению с остальными газами.

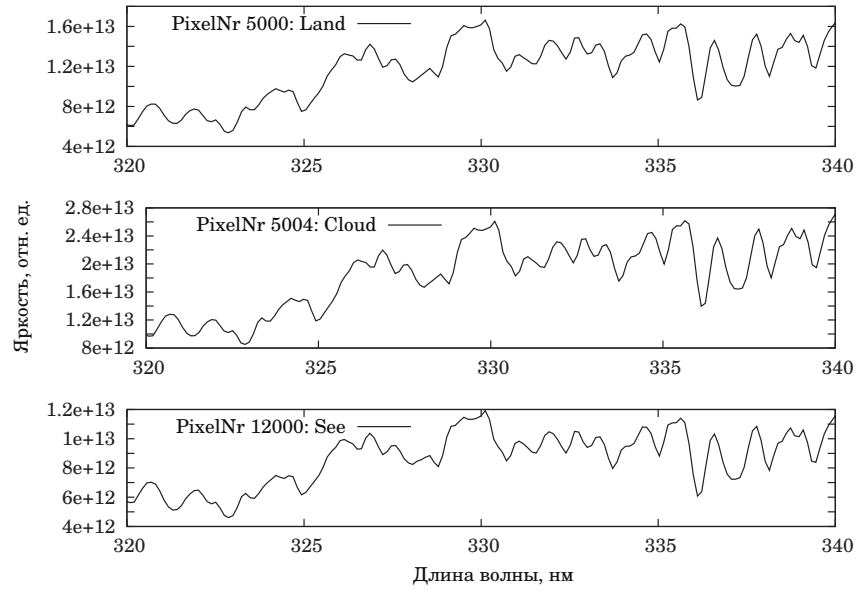


Рисунок 1.6 — Спектры отраженного излучения, измеренные инструментом GOME-2, в трех пикселях. Сверху вниз: пиксель № 5000 – над землей (Latitude: 64.07N, Longitude: 73.65E, SZA: 47.35); пиксель № 5004 – над облаком (Latitude: 63.19N, Longitude: 83.58E, SZA: 43.52, cloud fraction = 1); пиксель № 12000 – над морем (Latitude: 13.81S, Longitude: 63.51E, SZA: 54.78).

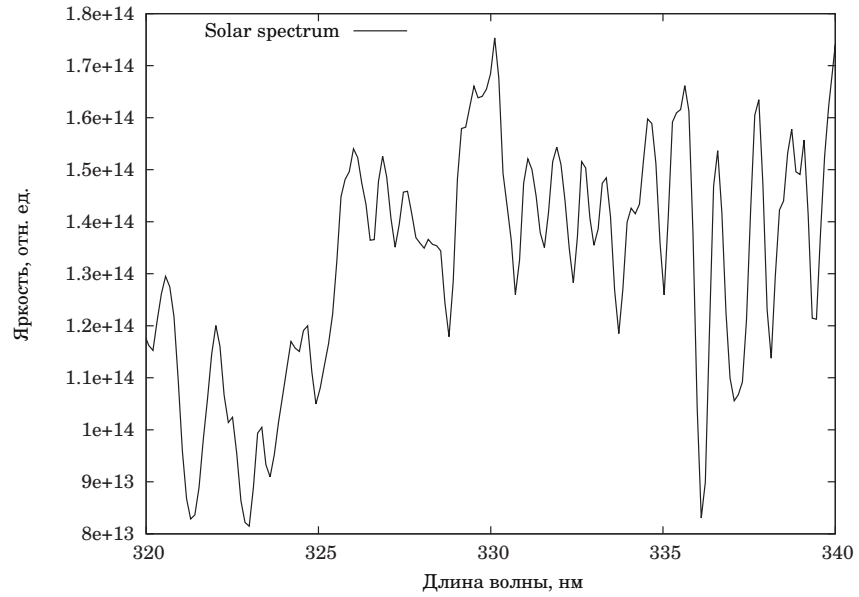


Рисунок 1.7 — Спектр солнечного излучения, измеренный инструментом GOME-2.

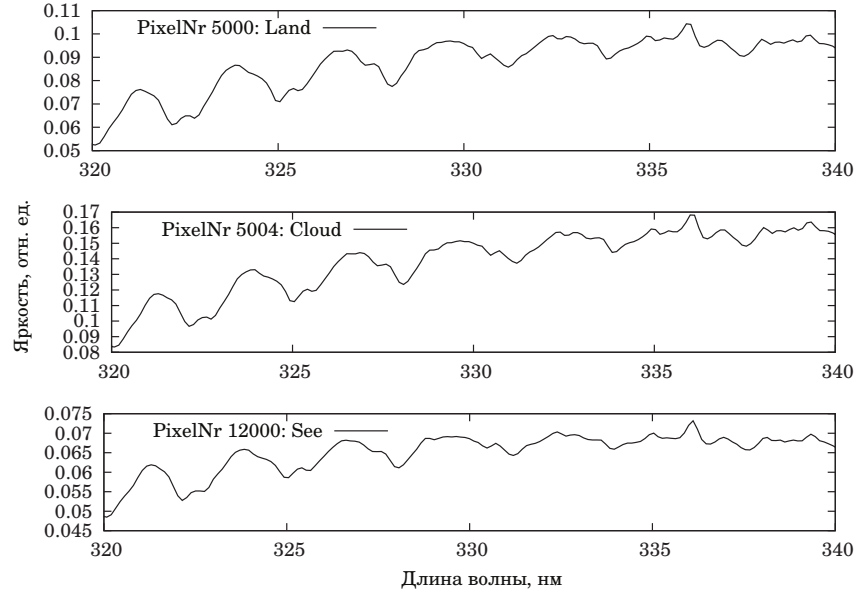


Рисунок 1.8 — Нормированные на солнечный спектр спектры отраженного излучения. Пиксели соответствуют рисунку 1.6.

1.2.2 Молекулярное рассеяние

При интерпретации спектральных данных необходимо отфильтровать или учесть при прямом моделировании факторы, сильно влияющие на спектр, но не являющиеся предметом интереса в рассматриваемой задаче. В нашем случае это молекулярное рассеяние и облака (частично аэрозоли). **Молекулярное рассеяние** может быть упругим (релеевским) и неупругим (рамановским). Сечение неупругого рассеяния составляет примерно 4 % от сечения упругого рассеяния. В работе [28] проанализировано влияние неупругого рассеяния на измеряемый спектр в диапазоне 300-400 нм с помощью метода Монте-Карло. Влияние имеет сложную спектральную зависимость, однако коррелирует с сечением поглощения озона. Поэтому неупругое рассеяние выступает в роли «псевдопоглотителя». В работе [29] показано, что пренебрежение неупругим рассеянием при расчете полосы Хюггинса приводит к недооценке общего содержания озона до 10 %. Строгий учет неупругого рассеяния существенно осложняет расчет, так как для каждой спектральной линии необходимо решить несколько задач с изменением частоты излучения. Поэтому в операционных алгоритмах имеет смысл учитывать неупругое рассеяние в первом приближении [30] или эмпирически [31].

Следуя [32], сечение рэлеевского рассеяния можно записать в виде

$$\sigma_{scat}^{Ray} = \frac{32\pi^3 (n^{air} - 1)^2}{3L^2\lambda^4} \times \frac{6 + 3\Delta}{6 - 7\Delta}, \quad (1.1)$$

где Δ – фактор деполяризации, L – число Лешмидта и n^{air} – показатель преломления атмосферы. Как видно из (1.1), сечение рэлеевского рассеяния зависит от длины волны света как $\sim \lambda^{-4}$. Поэтому рэлеевское рассеяние является определяющим в ультрафиолетовом диапазоне. В видимом и ближнем инфракрасном диапазонах доминирующим становится рассеяние на **аэрозолях**, сечение которого зависит от длины волны света как $\sim \lambda^{-1}$. Заметим, что Δ зависит от концентрации газов. В работах [33] и [34] рекомендуется при моделировании сигнала в полосе Хюггинса использовать одну из полуэмпирических моделей, описанных в них. Обе модели дают схожие результаты для σ_{scat}^{Ray} при максимальном расхождении не превышающем 0.7% в спектральном диапазоне 300 – 800 нм.

Индикатриса рэлеевского рассеяния имеет вид $a + b \cos^2 \theta$, где θ – угол рассеяния. Разложение индикатрисы по полиномам Лежандра P_l ,

$$x(\cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) x_l P_l(\cos \theta), \quad (1.2)$$

имеет только три члена: $x_0 = 1$, $x_1 = 0$, $x_2 = \frac{1}{5} \frac{1-\Delta}{2+\Delta}$.

1.2.3 Аэрозоли

Аэрозоли сильно влияют на процесс переноса излучения в атмосфере, и как следствие, на измеряемый спектрометрами сигнал. Концентрация аэрозолей может меняться от 0.01 см^{-3} в разреженных слоях атмосферы до более чем 10^4 см^{-3} в загрязненных промышленных районах. Размеры частиц находятся в диапазоне $10^{-2} \div 50$ мкм. Выделяют так называемые первичные и вторичные аэрозоли. К первичным относятся аэрозоли от природных или антропогенных источников (минеральная пыль, частицы океанической соли, вулканическая пыль, биологические аэрозоли, промышленная пыль, дым и т.п.). Вторичные аэрозоли образуются в атмосфере через химические реакции с участием диоксида серы, диоксидов азота и биогенных летучих органических соединений [35]. Расчет оптических свойств может быть выполнен с помощью теории Ми для сферических частиц [36] и метода Т-матриц для несферических частиц [37, 38]. Разнообразие размеров, формы и концентрации аэрозолей создают ряд практических проблем при моделировании отраженного излучения, так как исходные данные, необходимые для расчета (распределение размеров частиц по размерам, форма частиц и концентрация) в общем случае неизвестны. Поэтому на практике удобно использовать аэрозольные модели, где приведены необходимые параметры, полученные в результате наблюдений. Примерами аэрозольных моделей служат модели OPAC [39] и 6S [40]. Обзор существующих

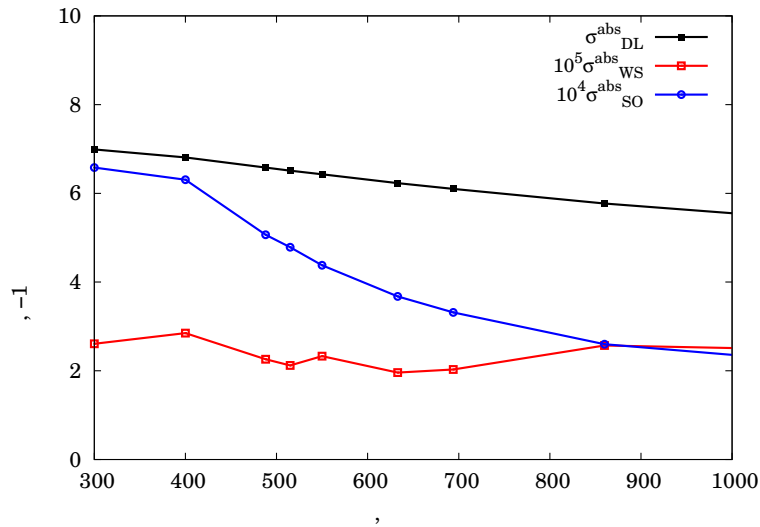


Рисунок 1.9 — Зависимость показателя поглощения аэрозоля от длины волны. Данные приведены для 3 базовых классов модели 6S [40].

моделей приведен в [41]. Как правило, выделяются несколько базовых классов, на основе которых строятся ряд вторичных классов. Например, Vermote et al. [40] выделили 4 базовых класса: пылевидный (dust-like – DL), растворимый в воде (water-soluble – WS), океанический (oceanic – OC), и копоть (soot – SO). Оптические свойства аэрозолей систематизированы в [42]. На рисунке 1.9 приведены показатели поглощения для DL-, WS- и SO- классов. Видно, что в отличие от сечения поглощения озона, зависимость показателей поглощения аэрозолей гладкая и не имеет ярко выраженных спектральных особенностей. Заметим также, что степень вытянутости индикатрисы рассеяния растет с размером частиц. Влияние аэрозолей на спектр приближенно может быть воспроизведено заменой альбедо поверхности на некоторое эффективное альбедо, которое определяется в ходе решения обратной задачи. Возможные ошибки такого подхода рассмотрены в части 1.5.1. Заметим также, что максимум концентрации озона достигается при высоте около 30 км. Тропосферный аэрозоль простирается от поверхности до высоты ≈ 10 км. Поэтому для тропосферного аэрозоля приближение эффективного альбедо работает особенно хорошо. Стратосферный аэрозоль может достигать высоты 50 км. Его параметры (прежде всего оптическая толщина) могут быть определены альтернативными методами и при условиях наблюдения без облачности.

1.2.4 Облака

Влияние облачности на процесс переноса излучения в атмосфере рассмотрено в монографии В.Е.Зуева и Г.А.Титова [43]. Основные механизмы этого влияния следующие:

1. альbedo-эффект — увеличение функции отражения;
2. эффект экранирования — снижение влияния газов, находящихся под облаком, на функцию отражения (см. рисунок 1.3);
3. процесс многократного рассеяния и поглощения внутри облака.

Отдельно выделим эффект больших капель, приводящий к росту асимметрии индикатрисы рассеяния. Все эти эффекты были подробно изучены численно с помощью прямого моделирования (см. [44–46] и ссылки в них). Отметим, что в DOAS из спектров вычитается полином малой степени. Вычитание гладкой компоненты спектра уменьшает влияние указанных эффектов. Подробно влияние облачности на измеряемый сигнал и на определение содержания озона будет рассмотрено в следующих главах диссертации.

Моделирование сигнала отраженного излучения при актуальных микрофизических параметрах облака трудоемко и на практике невозможно в операционных алгоритмах. Также как и для аэрозолей, для облаков выделяют специальные классы. К примеру в базе OPAC выделяют следующие классы: Stratus (continental, maritime), Cumulus (cont., clean, cont. polluted, maritime), Fog, Cirrus (1st, 2nd, 3rd). Исходя из географического положения, высоты, температуры и оптической толщины делается выбор в пользу одного из классов. По сути, использование определенного класса для облака является регуляризацией обратной задачи, так как сокращает множество возможных решений.

1.3 Моделирование сигнала, регистрируемого ОЭС ОДЗ, средствами уравнения переноса

1.3.1 Классификация методов решения уравнения переноса

Оптические методы дистанционного зондирования атмосферы основаны на решении уравнения переноса излучения. В отличие от инфракрасного диапазона, где работают достаточно простые модели переноса, основанные на моделях однократного и квазиоднократного рассеяния, при решении задачи о переносе излучения в ультрафиолетовом диапазоне приближенные модели [47–49], как правило, приводят ошибкам в решении более 1%. Такой уровень ошибки слишком высок при моделировании сигнала современных ОЭС ОДЗ, обладающих отношением «сигнал-шум» $\sim 10^3$. Основная причина высокой ошибки – некорректный учет

многократного рассеяния. Поэтому учет многократного рассеяния должен производиться на основе точного и в тоже время быстрого алгоритма.

Атмосфера планеты неоднородна по вертикальному и горизонтальным направлениям. Строго говоря, описание процесса переноса излучения должно строиться в рамках трехмерной модели для функции яркости $I(x, y, z, \mu, \varphi)$, где x, y, z – координаты, μ – косинус зенитного угла и φ – азимутальный угол. Однако для вычислительной эффективности операционные алгоритмы строятся на основе одномерной модели, в которой неоднородная атмосфера представляется в виде системы однородных слоев. Решение уравнения переноса в таком случае зависит только от вертикальной координаты z и двух углов. Иногда удобно перейти от координаты z к безразмерной оптической толщине τ . Соответственно, уравнение переноса в плоско-параллельной геометрии формулируется для функции $I(\tau, \mu, \varphi)$ следующим образом:

$$\mu \frac{dI(\tau, \mu, \varphi)}{d\tau} = I(\tau, \mu, \varphi) - S(\tau, \mu, \varphi), \quad (1.3)$$

где функция источников S имеет вид

$$S(\tau, \mu, \varphi) = Q(\tau, \mu, \varphi) + \frac{\omega(\tau)}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 P(\tau, \mu, \varphi, \mu', \varphi') I(\tau, \mu', \varphi') d\mu' d\varphi', \quad (1.4)$$

$Q(\tau, \mu, \varphi)$ – внутренний источник, обусловленный собственным тепловым излучением; $\omega(\tau)$ – альбеда однократного рассеяния; $P(\tau, \mu, \varphi, \mu', \varphi')$ – индикатриса рассеяния. Второе слагаемое в (1.4) обусловлено многократным рассеянием. Граничные условия в случае ламбертовской подложки записываются в виде:

$$\begin{cases} I(0, \mu < 0, \varphi) = F_{\text{sun}} \delta(\mu + \mu_0) \delta(\varphi - \varphi_0), \\ I(\tau_s, \mu > 0, \varphi) = \frac{\rho}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 I(\tau_s, -\mu', \varphi') d\mu' d\varphi, \end{cases} \quad (1.5)$$

где τ_s – координата подложки, ρ – альбеда поверхности, F_{sun} – падающий солнечный поток. При этом $\mu > 0$ соответствует восходящему потоку, а $\mu < 0$ – нисходящему, косинус угла падения $\mu_0 > 0$. При описании переноса в ультрафиолетовой области собственным тепловым излучением $Q(\tau, \mu, \varphi)$ пренебрегают по сравнению с солнечным излучением, и функция источников упрощается:

$$S(\tau, \mu, \varphi) = \frac{\omega(\tau)}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 P(\tau, \mu, \varphi, \mu', \varphi') I(\tau, \mu', \varphi') d\mu' d\varphi'. \quad (1.6)$$

В дальнейшем мы также будем использовать краевую задачу для уравнения переноса, записанную через коэффициенты экстинкции σ_{ext} и рассеяния σ_{scat} . Такой формализм более

удобен в тех случаях, когда исходными данными для расчета являются зависимости σ_{ext} и σ_{scat} от высоты. Оптическая толщина и альбедо однократного рассеяния слоя являются интегральными параметрами слоя:

$$\tau = \int_{z_1}^{z_2} \sigma_{\text{ext}}(z) dz, \quad \omega = \frac{\int_{z_1}^{z_2} \sigma_{\text{scat}}(z) dz}{\int_{z_1}^{z_2} \sigma_{\text{ext}}(z) dz}. \quad (1.7)$$

Эти параметры удобны для теоретического рассмотрения моделей переноса. Предполагается, что между выбранными уровнями находится однородный слой.

Краевая задача содержит сингулярность (δ -функцию в (1.5)), которая распространяется вглубь среды, что делает невозможным дискретизацию интеграла в функции источников (1.6). В методе, предложенном Eddington [50], развитым Milne [51] и Chandrasekhar [52], для численного решения полную яркость представляют в виде суммы прямого солнечного излучения I_{dir} и диффузионной части I_{dif} :

$$I(\tau, \mu, \varphi) = I_{\text{dir}}(\tau, \mu, \varphi) + I_{\text{dif}}(\tau, \mu, \varphi). \quad (1.8)$$

Затем краевая задача формулируется для диффузионной части, для которой и строится численная схема решения. В правой части уравнения переноса для диффузионной части появляется дополнительная функция источников, обусловленная нерассеянным потоком излучения. Для учета сферичности атмосферы была предложена псевдо-сферическая модель атмосферы, в которой функция источников вычисляется в сферической геометрии, а диффузионная часть вычисляется в плоскопараллельной геометрии. В работе [53] было показано, что для наблюдений в надир, псевдо-сферическая модель справедлива для углов зондирования до 90° . В работе [54] также предложено учитывать сферичность при интегрировании функции источников вдоль направлений наблюдения.

Универсальным методом решения уравнения переноса является метод Монте-Карло [55, 56]. С его помощью можно рассчитать яркость отраженного излучения практически при любых неоднородных сред. Метод особенно эффективен при оценке интегральных параметров, таких как облученность. Основной недостаток метода – низкая скорость счета при оценке локальных характеристик таких как яркость в данной точке в заданном направлении. Статистическая ошибка метода уменьшается как $N^{-0.5}$, где N – количество рассчитанных траекторий. На практике количество траекторий можно уменьшить с помощью метода локальной оценки. Тем не менее получение результата с погрешностью не более 0.01 % требует интенсивных вычислений.

Развито несколько детерминированных методов решения уравнения переноса. Формальное решение уравнения переноса может быть записано в виде ряда Неймана. Однако на практике оно не используется, так как нарастает от члена к члену кратность интегрирования, а ряд сходится очень медленно в случае слабого поглощения в среде. Получили распространение численные методы решения. Среди них метод сложения-удвоения, метод сферических гармоник (МСТ) и метод дискретных ординат. Метод сложения-удвоения основан на рассмотрении оптически тонкого слоя, для каждого можно получить матрицы отражения и пропускания в приближении однократного рассеяния или с помощью Падэ(Pade)-аппроксимации. Далее в рамках матрично-операторного метода два оптически тонких слоя объединяются в слой с толщиной вдвое большей. Процедура сложения-удвоения повторяется до тех пор, пока не получены матрицы отражения и пропускания для слоя с данной оптической толщиной. Метод прост в реализации. Однако скорость решения уменьшается с ростом толщины слоя. Кроме того, неудачный выбор начальной толщины слоя может привести к существенной ошибке в решении. В методе сферических гармоник и в методе дискретных ординат интеграл в (1.6) заменяется конечной суммой [57]. В методе дискретных ординат решение уравнения переноса приобретает ясную лучевую трактовку, что упрощает формулировку сложных граничных условий. Метод дискретных ординат был реализован в радиационных кодах DISORT¹ [58], SCIATRAN² [59], DOME [60] и других. Дискретизация уравнения будет подробно описана в Главе 2.

1.3.2 Учет сильной анизотропии рассеяния

Индикатрисы рассеяния для крупных частиц, например, капли в облаках или частицы грубой фракции аэрозоля, сильно анизотропны из-за пика рассеяния на малые углы. Численные методы решения уравнения переноса используют разложение индикатрисы в ряд по полиномам Лежандра на $2M$ членов разложения:

$$P(\tau, \mu, \varphi, \mu', \varphi') = P(\tau, \cos \Theta) = \sum_{l=0}^{2M-1} (2l+1) x_l(\tau) P_l(\cos \Theta), \quad (1.9)$$

$$\cos \Theta = \mu\mu' + \sqrt{(1-\mu^2)(1-\mu'^2)} \cos(\varphi - \varphi'). \quad (1.10)$$

¹ftp://climate1.gsfc.nasa.gov/wiscombe/Multiple_Scatt/

²<http://www.iup.uni-bremen.de/sciatran/>

Большое количество членов разложения, необходимых для представления сильно анизотропной индикатрисы, создают численные проблемы при расчете диффузионной части яркости. В частности, для аккуратного представления интеграла в правой части уравнения переноса может потребоваться до ста дискретных ординат, что делает расчет медленным. Проблема решения уравнения переноса при сильно вытянутых индикатрисах изучалась в работе [61]. Были предложены различные методы ускорения алгоритмов решения уравнения переноса без значительной потери в точности. Так, в delta-M методе [62] точная индикатриса заменяется линейной комбинацией δ -функции и “урезанной” индикатрисой P^*

$$P(\tau, \cos \Theta) = f \delta(1 - \cos \Theta) + (1 - f) P^*(\tau, \cos \Theta), \quad (1.11)$$

где f – доля анизотропного рассеяния. Требование сохранения среднего косинуса при преобразовании индикатрисы приводит к масштабному преобразованию и замене исходных параметров слоя на эффективные:

$$\tau^* = (1 - \omega f) \tau, \quad \omega^* = \frac{(1 - f)}{1 - \omega f} \omega \quad (1.12)$$

$$P^*(\tau, \cos \Theta) = \sum_{l=0}^{2M-1} (2l+1) x_l^*(\tau) P_l(\cos \Theta), \quad (1.13)$$

$$x_l^*(\tau) = \frac{x_l(\tau) - f}{1 - f}, \quad l = 0, \dots, 2M - 1. \quad (1.14)$$

Delta-M метод позволяет значительно снизить количество членов разложения, участвующих в расчете, однако искажает исходную краевую задачу. Это может привести к сильным осцилляциям в угловом распределении яркости и ошибкам при малых углах визирования. В контексте обратных задач урезание индикатрисы приводит к пренебрежению грубой фракцией аэрозоля. Поэтому delta-M метод обычно используется в сочетании с TMS-методом [63] первого или второго порядков (TMS второго порядка также называется IMS). В нем вклады от однократного (в IMS и двукратного) рассеяния, рассчитанные с урезанной индикатрисой, пересчитываются с учетом правильной индикатрисы. Так получила распространение идея пост-обработки (post-processing): сначала уравнение переноса решается с «удобными» параметрами; затем полученное приближенное решение корректируется. Необходимо отметить, что TMS-коррекция является «полуэмпирической»: из решения вычитается вклад однократного рассеяния, рассчитанный при «урезанной индикатрисе» и масштабированных параметрах τ^* и ω^* , а затем добавляется вклад однократного рассеяния, рассчитанный для правиль-

ной индикатрисы, но при масштабированных параметрах τ^* и ω^* , а не исходных параметрах τ и ω . Как следствие, TMS-коррекция приводит к существенным ошибкам в решении при углах, близких к углу падения; и (что парадоксально на первый взгляд) бывают случаи, когда вклад больших кратностей рассчитывается точнее вклада малых кратностей. В этом смысле TMS-коррекция не является «панацеей» от проблемы сильно вытянутых индикатрис, и для конкретного случая требуется анализ точности метода. Есть ряд работ [49, 64–67], посвященных исследованию точности моделей, в которых учитывается конечное число кратностей рассеяния. Однако такие модели эффективны только в случае оптически тонких слоев, так как с ростом оптической толщины слоя быстро увеличивается число кратностей рассеяния.

Альтернативный подход заключается в аналитическом выделении анизотропной части яркости и построении численной схемы для разности между полной яркостью и анизотропной частью, называемой гладкой или регулярной частью. Этот подход развивался в работах В.В. Соболева [68–70], где предложено выделять однократное рассеяние. Впоследствии идея развивалась в работах В.П. Будака [71, 72] и формализовалась в малоугловую модификацию метода сферических гармоник [73], учитывающую все кратности рассеяния на основе малоуглового приближения. Данный метод был обобщен на векторный случай (с учетом поляризации) [74, 75]. В работах [76, 77] было показано, что вычитание анизотропной части приводит к гладкой регулярной части в случае сильно анизотропного рассеяния, для расчета которой требуется меньше количество дискретных ординат и азимутальных гармоник. На основе развитой теории был создан радиационный код MDOM [78]. Отметим, что такой подход принципиально не требует пост-обработки, так как уравнение переноса решается для исходной индикатрисы. При выводе расчетных формул в малоугловом приближении предполагается, что длина пути рассеянного света одинакова для всех фотонов. Учет дисперсии выполнен в работе [79]. Однако он приводит к значительному усложнению расчета при небольшом повышении точности. В заключении работы [80] было предложено использовать гибридный подход: рассчитывать функцию пропускания через слой с помощью MDOM, а функцию отражения с помощью выделения однократного рассеяния.

В работах [7A, 9A, 12A] был проведен анализ различных методов решения уравнения переноса и было показано на физическом уровне строгости, что после выделения анизотропной части решения дискретизованное уравнения переноса для плоского слоя имеет единственное аналитическое решение в матричной форме. Дальнейшее исследование вопросов сходимости показало, что при параметрах асимметрии индикатрисы ~ 0.8 – 0.9 код MDOM обеспечивает быструю сходимость в среднем (по энергетике). Для аккуратного описания деталей угло-

го распределения (радуги) требовалось то же число дискретных ординат и азимутальных гармоник, что и коды на основе традиционного подхода. Для уточнения решения в равномерной метрике в работах [81, 82] было предложено вернуться к идее пост-обработки и использовать технику, в чем-то схожую с методом интегрирования функции источников [83]. Приближенное решение в квадратичной метрике, а затем итерация от него для сходимости в равномерной метрике, эквивалентно методу синтетических итераций, развитому в теории переноса нейтронов [84, 85].

Несмотря на то, что уравнение переноса для плоской геометрии имеет единственное аналитическое решение, для конкретных ситуаций метод может быть оптимизирован за счет снижения размерности исходной задачи [86, 87], адаптации алгоритма к расчетной модели [88] и параметризации расчетной модели на основе простых аналитических формул [89–91].

1.4 Линеаризация алгоритмов решения уравнения переноса

Проблему восстановления параметров атмосферы по спектру рассеянного излучения можно формализовать в виде обратной задачи. Для вектора $\mathbf{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ параметров среды поставим в соответствие вектор $\mathbf{Y} = \{y_1, y_2, \dots, y_m\}$ значений яркости излучения, отраженного от атмосферы при разных значениях длин волн и разных геометриях, через прямую модель F :

$$\mathbf{Y} = F(\mathbf{X}). \quad (1.15)$$

Основу прямой модели составляет описание процессов рассеяния и поглощения света в атмосфере. Восстановление параметров атмосферы предполагает решение обратной задачи

$$\mathbf{X} = F^{-1}(\mathbf{Y}). \quad (1.16)$$

Обычно обращение (инверсия) выполняется итерационно. На k -той итерации функция $F(\mathbf{X})$ раскладывается в ряд Тейлора около текущего вектора параметров атмосферы \mathbf{X}_n . Далее в разложении сохраняется только линейное слагаемое, что приводит к итерационной схеме:

$$\mathbf{Y}^{(k+1)} - \mathbf{Y}^{(k)} = \mathbf{K}^{(k)}(\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}), \quad (1.17)$$

где

$$\mathbf{K}^{(k)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_2}{\partial x_n} \\ \frac{\partial y_m}{\partial x_1} & \frac{\partial y_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

– матрица Якоби [92] на k -ой итерации (в англоязычной литературе упоминается также как Jacobians, weighting functions³) – матрица, содержащая частные производные от функции яркости по искомым параметрам атмосферы, $\mathbf{Y}^{(k)} = F(\mathbf{X}^{(k)})$. Инверсия осуществляется с помощью методов нелинейной оптимизации. Разработаны специальные методы регуляризации плохо обусловленных задач дистанционного зондирования, основанные на методе Гаусса-Ньютона [93]. В [94] описан алгоритм восстановления параметров атмосферы из спектров в ультрафиолетовом диапазоне, объединяющий регуляризацию Тихонова и метод Гаусса-Ньютона. Нахождение матрицы Якоби называется линеаризацией модели переноса излучения, а программы и модели, позволяющие рассчитывать значения яркости и матрицу Якоби, линеаризованными. Далее рассмотрим некоторые способы расчета матрицы Якоби.

1.4.1 Метод конечных разностей

Самый простой способ расчета матрицы Якоби это метод конечных разностей:

$$K_{ij} = \frac{dY_j}{d\xi_i} \approx \frac{F(\mathbf{X}_j + \Delta\xi_i) - F(\mathbf{X}_j)}{\Delta\xi_i}, \quad (1.18)$$

где ξ_i – i -тый параметр атмосферы или подстилающей поверхности. Несмотря на его простоту, этот подход не рекомендуется использовать по двум причинам. Во-первых, как правило, матрица Якоби рассчитывается для нескольких десятков параметров. N -слойная модель атмосферы может потребовать расчёта $2N + 1$ производной, так как каждый слой характеризуется оптической толщиной и альбедо однократного рассеяния, а подстилающая поверхность соответствующим альбедо. Для их оценки с помощью конечных разностей требуется $2N + 2$ вызова прямой модели. В зависимости от точности дискретизации атмосферы количество слоев в расчетах лежит в диапазоне $N = 10 \div 100$. Таким образом, линеаризованная с помощью конечных разностей модель может быть на два порядка более трудоемкой, чем прямая.

³В англоязычных работах, например, в [54, 83], посвященных решению обратных задач, словом “Jacobian” называют также и саму матрицу Якоби.

Во-вторых, возникает проблема выбора оптимального шага $\Delta\xi_i$ (при большом значении $\Delta\xi_i$ уменьшается точность аппроксимации производной конечной разностью, а при очень маленьком $\Delta\xi_i$ велика аппаратная погрешность). В задачах восстановления микрофизических свойств аэрозолей требуется производная также по коэффициентам разложения индикатрисы. Эти производные на практике не поддаются вычислению с помощью конечных разностей из-за узкого интервала для $\Delta\xi_i$, в которых можно получить устойчивый результат.

1.4.2 Методы автоматического дифференцирования

Модель можно линеаризовать и с помощью алгоритмов автоматического дифференцирования⁴ [95, 96]. Большинство моделей основаны на элементарных функциях и математических операциях, для которых известны правила дифференцирования. Текст кода программы, решающей прямую задачу, для систем автоматического дифференцирования является исходными данными. Далее, каждая математическая функция и подпрограмма дифференцируется по правилу дифференцирования сложной функции. На выходе мы получаем линеаризованный код. Такой подход был применен в работах [97, 98] для line-by-line модели для инфракрасной области. Применительно к алгоритмам решения уравнения переноса в ультрафиолетовой области указанный способ имеет два недостатка:

1. алгоритм решения, как правило, включает в себя задачу на собственные значения. Эта операция не относится к числу элементарных и прямое дифференцирование кода приводит к неоптимальному алгоритму.
2. система автоматического дифференцирования в принципе не предназначена для генерации оптимизированного кода. Поэтому для приложений, в которых важна скорость счета, полученный линеаризованный код необходимо оптимизировать вручную, что может представлять более трудоемкую задачу, чем исходная.

1.4.3 Аналитическое дифференцирование

В последнее десятилетие получили распространение программы, основанные на аналитических методах расчета матрицы Якоби, такие как LIDORT/VLIDORT [88], SCIATRAN [59], DOME [99]. В настоящее время широко используются два метода аналитической линеаризации. Первый из них – метод прямого дифференцирования, развитый R.J.D.Spurr в

⁴<http://www.autodiff.org>

контексте метода дискретных ординат. В рамках этого метода рассматривается частная производная входных данных модели по искомому параметру; далее, применяя правило цепного дифференцирования, рекурсивно линеаризуется весь алгоритм. В работах [54, 100] показано, что метод дискретных ординат может быть полностью линеаризован аналитически без привлечения дополнительных допущений. Код LIDORT/VLIDORT, созданный R.J.D.Spurr, в настоящее время является одним из самых широко используемых радиационных кодов при решении обратных задач [101–103]. Та же идея использовалась при создании радиационных кодов для инфракрасного диапазона KOPRA [104] и MOLIERE [105].

Второй метод основан на использовании свойств сопряженных уравнений (*forward-adjoint perturbation theory*). Он был предложен Б.В.Кадомцевым [106] и далее развит в теории переноса нейтронов [107]. В этом подходе производная от яркости выражается через производные от функции источников и оператора уравнения переноса. Впервые для плоскопараллельного слоя были получены аналитические выражения для частных производных в работе Г.И. Марчука [108], и позже в работах Box [109], Ustinov [110], Rozanov et al [111], Landgraf et al [112], для псевдо-сферической атмосферы в работах Walter et al [113] и Doicu et al [99], а для сферической в работе Walter et al [114]. Алгоритм линеаризации через сопряженный оператор не зависит от метода решения прямой задачи, а определяется лишь исходным уравнением. Тот же формализм может быть применен к трехмерным задачам.

Аналогичные соотношения можно получить, если продифференцировать исходное уравнение переноса по искомому параметру ξ_i , что сделано в работах Н.Н. Роговцова [115, 116]. После дискретизации интеграла получается система дифференциальных уравнений, аналогичная исходной, но с другой функцией источников. Как следствие, общее решение системы для $dI/d\xi_i$ такое же, как общее решение системы для I . Для расчета новой функции источников требуется знать решение внутри среды. Сравнивая метод прямого дифференцирования метода дискретных ординат с *forward-adjoint perturbation* методом (или с дифференцированием исходного уравнения), необходимо отметить следующее:

1. Метод прямого дифференцирования менее устойчив при большом числе дискретных ординат и азимутальных гармоник (при $M > 1000$, хотя этот случай не реалистичен для рассматриваемых задач).
2. Метод сопряженных уравнений требует нахождения решения внутри среды, что изначально не требуется в исходной прямой задаче. Относительная ошибка нахождения производных больше относительной ошибки яркости (к примеру, при недостаточном числе дискретных ординат), что нежелательно при решении обратных задач.

3. В [99] проведено сравнение методов; было показано, что погрешности методов одного порядка при более высокой скорости счета *forward-adjoint perturbation* метода.

Обратные задачи дистанционного зондирования являются плохо обусловленными. Ошибка, содержащаяся в исходных данных (спектре), может приводить к катастрофической потере точности при решении обратной задачи и, как следствие, к нефизичному результату. Для того, чтобы получить физически корректный результат, применяют регуляризацию решения [117, 118]. Теория решения обратных задач подробно изложена в монографиях Rodgers [119] и Doicu [120]. Методы регуляризации зависят от конкретной задачи. Методы, используемые для восстановления профиля озона из спектров ультрафиолетового диапазона, описаны в работе [121] и проанализированы в следующем параграфе.

1.5 Извлечение информации о содержании озона из полосы Хаггинса

Озон является важным компонентом атмосферы Земли, обеспечивающим условия, благоприятные для жизни. Процессы поглощения ультрафиолетовой части солнечного спектра оказывают существенное влияние на энергетический баланс планеты. После обнаружения так называемых озоновых дыр [122] особое внимание уделяется вопросам сохранения озонового слоя [123, 124]. Отметим, что концентрация озона характеризуется экстремальной изменчивостью из-за сложных физико-химических процессов, происходящих с ним в атмосфере. В 1975м году, то есть за 10 лет до работы Farman et al. [122], породившей современные дискуссии о глобальном потеплении, Б.М.Смирнов публикует статью с количественным анализом теплового баланса Земли, динамики разрушения озонового слоя с учетом фотохимических реакций, где получены основные интегральные оценки устойчивости климатической системы. «Прогноз концентрации озона в будущем является очень сложной задачей, поскольку на его содержание самое существенное влияние оказывают фотохимические процессы с другими атмосферными газами, оценки вероятных изменений которых недостаточно надежны» [43]. Этим обстоятельством обусловлен повышенный интерес научного сообщества к вопросам сохранения озонового слоя, а также к измерению концентрации озона. Климат сам по себе является интересным объектом исследования, который провоцировал ученых на формулирование смелых гипотез, находивших впоследствии своё подтверждение [125] ⁵. Построение

⁵как отмечено в [126], «*Ozone depletion, and air pollution in general, and climate change, excite the imagination and stir the conscience*»

точной климатической модели с возможностью долгосрочных предсказаний является важной задачей с практической точки зрения. Её решение возможно только с помощью самых последних достижений в теории переноса излучения, в теории решения обратных задач, в фотохимии озона и в экспериментальных методах определения состава атмосферы, обзор которых приведен в [127]. Пионерские работы по измерению атмосферного озона были выполнены Г. Добзоном (*G.M.B. Dobson*). Им в 1924 году был создан спектрометр («добзонометр») [128], который измерял спектральные яркости прошедшего через атмосферу излучения при 305 нм и 325 нм. Их отношение позволяло оценить общее содержание озона. По сути, это был прообраз современной дифференциальной оптической спектроскопии поглощения (*Differential Optical Absorption Spectroscopy* (DOAS)) [129–133]. Выполняя измерения при разных зенитных углах солнца, удавалось оценить также и профиль озона с помощью т.н. «Umkehr»-эффекта [134]. Развитие средств регистрации и передачи излучения позволили значительно повысить точность измерений, а технологии дистанционного зондирования Земли из космоса позволили проводить измерения глобально, охватывая всю поверхность Земли. В настоящее время развиты методики определения вертикальных профилей содержания озона, основанные на измерениях в ультрафиолетовом [135], видимом, ближнем инфракрасном [136–139] и миллиметровом [140–143] диапазонах.

1.5.1 Восстанавливаемые параметры

Построим процедуру определения общего содержания озона и профиля озона из полосы Хюггинса, взяв в качестве прототипа операционный алгоритм GDP 4 [101]. Вектор параметров атмосферы \mathbf{X} , определяемый в результате решения обратной задачи, имеет следующий вид:

$$\mathbf{X} = \left[V \quad A_0 \quad A_1 \quad A_2 \quad \Delta\lambda \quad \Delta T \quad C_{\text{in}} \quad C_{\text{p}} \right]^T, \quad (1.19)$$

где (1) V – общее содержание озона, (2) A_i , $i = \{0, 1, 2\}$ – коэффициенты, параметризующие альбедо поверхности, (3) $\Delta\lambda$ – величина спектрального сдвига, (4) ΔT – температурный сдвиг, (5) C_{in} – поправочный коэффициент для учета неупругого рассеяния и (6) C_{p} – поправочный коэффициент для учета поляризации⁶. Разберем каждый параметр по отдельности.

(1) Общее содержание озона V

⁶Иногда в (1.19) добавляются параметры, имеющие отношение к преобразованию машинного сигнала в спектральную яркость, как описано в [144–146].

Общее содержание озона является мерой количества частиц в атмосферном столбе (таким образом, является «поверхностной концентрацией» $\left[\frac{\text{частиц}}{\text{м}^2}\right]$ молекул атмосферного газа); измеряется в добсоновских единицах (Dobson units – DU)⁷. По определению, общее содержание газа равно 1 DU, если толщина его слоя при нормальной температуре (0°C) и нормальном давлении (101330 Па) равна 0.01 мм, что соответствует 2.69×10^{20} молекулам в атмосферном столбе площадью 1 м² [148, 149].

Принципиальная проблема в определении профиля концентрации озона $N(z)$ заключается в том, что, как правило, геометрия измерений не позволяет восстановить концентрацию озона по высоте, даже с учетом мультиспектральности измерений. Математически это означает, что система уравнений для определения концентрации озона на разных высотах будет близка к линейно-зависимой с большим числом обусловленности. Поэтому в вектор \mathbf{X} закладывается общее содержание озона V , которое поддается определению. Далее, после нахождения V , восстанавливаемый профиль $N(z)$ ищется с помощью линейной интерполяции между стандартными профилями $N_i(z)$ из климатологической базы по известным координатам и времени измерения (например, базы TOMS⁸ [150]):

$$N(z) = \frac{V_{i+1} - V}{V_{i+1} - V_i} N_i(z) + \frac{V - V_i}{V_{i+1} - V_i} N_{i+1}(z). \quad (1.20)$$

Общее содержание озона у стандартных профилей V_i и V_{i+1} наиболее близко к восстановленному значению V , причем $V_i < V < V_{i+1}$, как показано на рисунке 1.10.

(2) Альbedo поверхности

Нижние граничные условия оказывают значительное влияние на спектр отраженного излучения. В алгоритме GDP5 [151] зависимость альbedo поверхности от длины волны описывается полиномом второй степени:

$$A(\lambda) = A_0 + A_1 \frac{\lambda - \lambda_{\text{ref}}}{\lambda_{\text{ref}}} + A_2 \left(\frac{\lambda - \lambda_{\text{ref}}}{\lambda_{\text{ref}}} \right)^2, \quad (1.21)$$

где A – альbedo поверхности, A_0 , A_1 и A_2 – коэффициенты полинома, λ_{ref} – среднее на интервале обработки значение длины волны. Модель, в которой спектральные свойства поверхности определяются в процессе решения обратной задачи, называется моделью внутреннего замыкания (*internal closure model*). Альтернативным подходом является получение инфор-

⁷Единица измерения содержания озона названа в честь исследователя Оксфордского университета Gordon Dobson, который в 1920-тых годах создал первый спектрометр для измерения содержания озона [128], который также носит его имя – «Dobsonmeter» или просто «Dobson». История создания и принцип работы спектрометра наряду с описанием первых кампаний измерения озона изложены в статье [147].

⁸<http://toms.gsfc.nasa.gov>

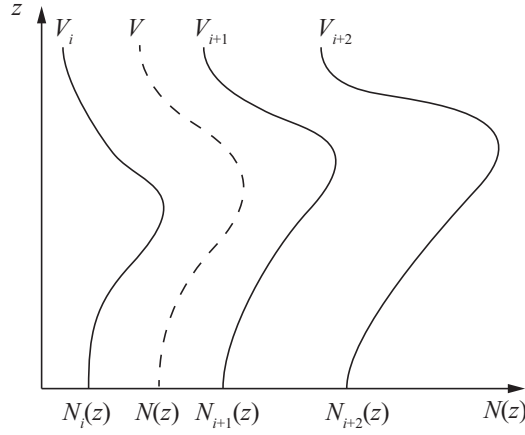


Рисунок 1.10 — Иллюстрация к формуле (1.20): расчет искомого профиля с помощью интерполяции между стандартными профилями.

мации о альбедо поверхности из климатологической базы. В таком случае соответствующая модель называется моделью внешнего замыкания (*external clousure model*). Как указано в [151], представление (1.21) параметризует не только рассеивающие свойства поверхности, но и влияние тропосферного аэрозоля, вклад которого трудно отделить от вклада подстилающей поверхности. Там же рассмотрен вопрос о том, к какой ошибке в определении общего содержания озона приводят могут привести аэрозоли. Функция яркости может сильно зависеть от параметров тропосферного аэрозольного слоя (10-20%). Однако при использовании внутреннего замыкания ошибка в концентрации озона составляет $\sim 1\%$ (при использовании внешнего замыкания $\sim 5\%$). Для сценариев с стратосферными аэрозолями (например, при извержениях вулканов) ошибка может достигать 10 %. Таким образом, модель внутреннего замыкания является удобной для учета рассеивающих свойств системы «тропосферный аэрозоль+подложка».

(3) Величина спектрального сдвига $\Delta\lambda$

Вследствие аппаратных причин измеряемый сигнал может быть сдвинут по оси длин волн. В результате спектрального сдвига полученные значения яркости следует соотносить не с «аппаратными» значениями λ_i , а со смещенными значениями $\lambda_i + \Delta\lambda$. Как правило, величина $\Delta\lambda$ меньше спектрального разрешения инструмента и считается постоянной на выбранной области обработки спектра. Для восстановления несмещенного спектра проводится кубический сплайн через массив измеренных точек в $\lambda_i - \Delta\lambda$ (см. рисунок 1.11), по которому и рассчитываются искомые значения спектра в точках λ_i .

(4) Температурный сдвиг ΔT

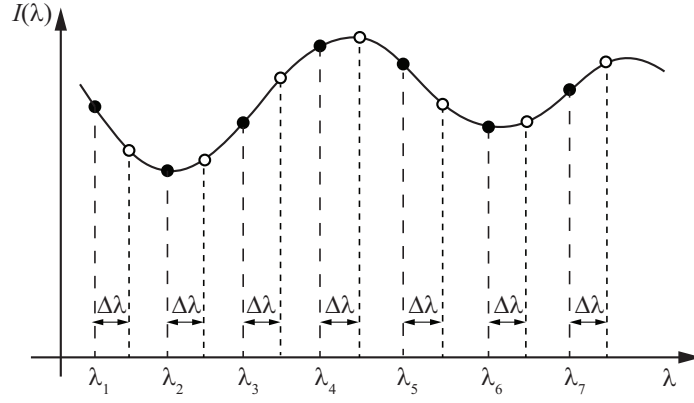


Рисунок 1.11 — Иллюстрация аппаратного сдвига спектра по оси длин волн: измеренные значения соответствуют не «аппаратным» значениям λ_i , а $\lambda_i + \Delta\lambda$.

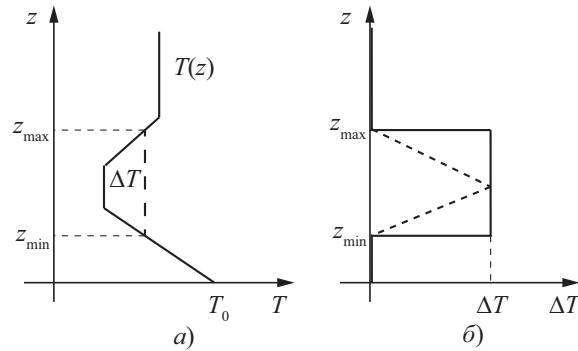


Рисунок 1.12 — Иллюстрация температурного сдвига: а) стандартный температурный профиль при температуре поверхности Земли T_0 и смещение температурного профиля в слое $z_{\min} \div z_{\max}$; б) ступенчатая и кусочно-линейная аппроксимация разницы между фактическим $T(z)$ и априорным $T_0(z)$ температурными профилями.

При построении расчетной модели атмосферы при известной температуре поверхности задаются априорным распределением температуры по высоте $T_0(z)$. Как правило, функцию $T_0(z)$ берут из климатологической базы. Для значений температуры, соответствующих этому профилю, рассчитываются параметры рассеяния. Однако фактический профиль температуры отличается от априорного. При определении концентрации озона и расчете сечений поглощения особенно важно знать температуру в слое, содержащем озон. Вводится параметр ΔT , описывающий разницу между фактическим $T(z)$ и априорным $T_0(z)$ температурными профилями. При этом форма функции $T(z) - T_0(z)$ может быть различной (например, ступенькой или кусочно-линейной), как показано на рисунке 1.12.

(5) *Поправочный коэффициент для учета неупругого рассеяния C_{in} (Ring-эффекта)*

Как правило, в моделях переноса рассеянного излучения учитываются упругое рассеяние (релеевское и Mie) и поглощение, но не учитывается неупругое (рамановское) рассеяние в атмосфере, сопровождающееся изменением длины волны фотона. Однако неупругое рассе-

яние света приводит к изменению спектра отраженного излучения, вследствие чего деление спектра отраженного излучения на солнечный спектр, описанное в разделе 1.1, не приводит к полному удалению линий Фраунгофера из сигнала. Этот эффект (аномальные линии Фраунгофера) впервые был обнаружен исследователями Grainger и Ring [152] и получил название Ring-эффект. Он был объяснен через рамановское рассеяние в работах Brinkmann [153] и Kattawar [154]. В работе [155] было показано, что Ring-эффект необходимо учитывать при восстановлении NO_2 . Впервые учет Ring-спектра (т.е. отношения спектра в модели без рамановского рассеяния к спектру в модели с рамановским рассеянием) при решении обратной задачи был произведен в работе [156].

Модели, аккуратно учитывающие неупругое рассеяние [157, 158], сложны с вычислительной точки зрения. При решении ряда прикладных задач Ring-эффект учитывается приближенно [31] и только для первого компонента вектора Стокса. Как показано в [159] на основе расчета Ring-спектра в векторной модели, такой подход применим при восстановлении атмосферных газов, но приводит к большой ошибке при определении свойств облаков. Методика учета Ring-эффекта в рамках метода дискретных ординат изложена в [160]. Получила распространение техника расчета, основанная на теории возмущений, обзор которой приведен в [30].

При обработке спектров в полосе Хюггинса будем использовать следующую стратегию. Рассчитываются спектры при некоем наборе исходных данных \mathbf{X}_0 без учета неупругого рассеяния $I_{\text{el}}(\mathbf{X}_0, \lambda)$ и с учетом неупругого рассеяния $I_{\text{in}}(\mathbf{X}_0, \lambda)$. Затем рассчитывается их относительная разница:

$$R(\mathbf{X}_0, \lambda) = \frac{I_{\text{in}}(\mathbf{X}_0, \lambda) - I_{\text{el}}(\mathbf{X}_0, \lambda)}{I_{\text{el}}(\mathbf{X}_0, \lambda)}. \quad (1.22)$$

Далее, полагая форму функции $R(\mathbf{X}, \lambda)$ постоянной (т.е. $R(\mathbf{X}, \lambda) \equiv R(\mathbf{X}_0, \lambda)$), проведем коррекцию спектра:

$$I(\mathbf{X}, \lambda) \equiv I_{\text{in}}(\mathbf{X}, \lambda) \cong I_{\text{el}}(\mathbf{X}, \lambda) (1 + C_{\text{in}} R(\mathbf{X}_0, \lambda)), \quad (1.23)$$

где C_{in} – поправочный коэффициент, который определяется при решении обратной задачи. Таким образом, учет неупругого рассеяния для текущей модели атмосферы производится только при решении обратной задачи, тогда как в прямой задаче неупругое рассеяние учитывается только при некоторых наборах исходных параметров. Такой принцип иногда называют «Direct intensity fitting» [161].

(6) *поправочный коэффициент для учета поляризации C_{p} .*

В рамках той же методологии, что и при учете Ring-эффекта, учитывается влияние поляризации. Значение первого параметра Стокса не совпадает с результатом расчета по скалярной модели (без учета поляризации). Как продемонстрировано в работах [162–165], в ультра-фиолетовом диапазоне расхождение может достигать 10 % и более для релеевской атмосферы, что не соответствует требованиям по точности, предъявляемым к алгоритмам расчета спектров. В [166] показано, что учет поляризации приводит к значительному повышению точности расчета спектров и, как следствие, точности определения содержания озона. Для ускорения вычислений расчет в векторной модели производится только при некоторых средних параметрах атмосферы \mathbf{X}_0 . А именно, рассчитываются спектр с учетом поляризации $I_v(\mathbf{X}_0, \lambda)$ и спектр без учета поляризации $I_s(\mathbf{X}_0, \lambda)$. Затем рассчитывается их относительная разница:

$$P(\mathbf{X}_0, \lambda) = \frac{I_v(\mathbf{X}_0, \lambda) - I_s(\mathbf{X}_0, \lambda)}{I_s(\mathbf{X}_0, \lambda)}. \quad (1.24)$$

Далее, полагая форму функции $P(\mathbf{X}, \lambda)$ постоянной (т.е. $P(\mathbf{X}, \lambda) \equiv P(\mathbf{X}_0, \lambda)$), корректируют спектр согласно соотношению:

$$I(\mathbf{X}, \lambda) \equiv I_v(\mathbf{X}, \lambda) \cong I_s(\mathbf{X}, \lambda) (1 + C_p P(\mathbf{X}_0, \lambda)). \quad (1.25)$$

Обобщая уравнения (1.23) и (1.25), получим итоговое выражение:

$$I_{(\text{in+p})}(\mathbf{X}, \lambda) = I(\mathbf{X}, \lambda) (1 + C_{\text{in}} R(\mathbf{X}_0, \lambda)) (1 + C_p P(\mathbf{X}_0, \lambda)), \quad (1.26)$$

где $I_{(\text{in+p})}(\mathbf{X}, \lambda)$ – спектр, в котором учтены неупругое рассеяние и поляризация, $I(\mathbf{X}, \lambda)$ – спектр, рассчитанный в скалярной модели без учета неупругого рассеяния. Таким образом, скорость расчета правильного спектра $I_{(\text{in+p})}(\mathbf{X}, \lambda)$ определяется скоростью расчета спектра $I(\mathbf{X}, \lambda)$, оптимизация алгоритма расчета которого составляет одну из задач данной работы.

1.5.2 Обращение (инверсия)

Вектор \mathbf{X} находится из условия минимизации функционала:

$$\mathcal{F}(\mathbf{X}) = \|\mathbf{y}_m - \mathbf{y}_s(\mathbf{X})\|^2 + \alpha \|\mathbf{X} - \mathbf{X}_a\|^2 \rightarrow \min, \quad (1.27)$$

где $\mathbf{y}_m \equiv \begin{bmatrix} I_m(\lambda_1) & \dots & I_m(\lambda_i) & \dots & I_m(\lambda_N) \end{bmatrix}^T$ – измеренный спектр, $\mathbf{y}_s(\mathbf{X}) \equiv \begin{bmatrix} I_s(\mathbf{X}, \lambda_1) & \dots & I_s(\mathbf{X}, \lambda_i) & \dots & I_s(\mathbf{X}, \lambda_N) \end{bmatrix}^T$ – рассчитанный спектр при параметрах \mathbf{X} , \mathbf{X}_a

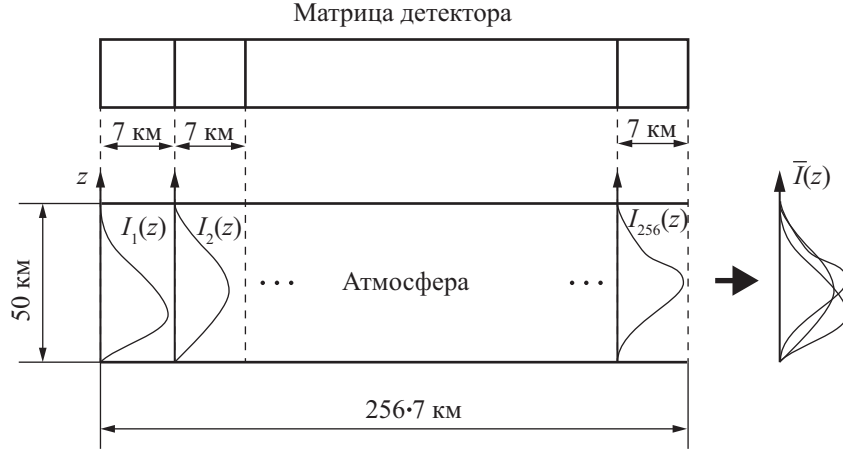


Рисунок 1.13 — Поле зрения инструмента: матрица детектора имеет 256 пикселей, при этом покрывается $7 \text{ км} \times (256 \cdot 7) \text{ км}$ площади поверхности Земли.

– априорное значение вектора \mathbf{X} , α – регуляризационный параметр. Наличие второго слагаемого (регуляризационного члена) в (1.27) приводит к тому, что решению «невыгодно» отличаться от \mathbf{X}_a слишком сильно. Вид регуляризационного члена не единственен, и может учитывать корреляцию между элементами вектора \mathbf{X} ⁹.

Обратная задача решается итерационно. На k -той итерации ищется $\mathbf{X}_k = \mathbf{X}_a + \Delta\mathbf{X}$, где

$$\Delta\mathbf{X} = (\mathbf{K}_k^T \mathbf{K}_k + \alpha \mathbf{E})^{-1} \mathbf{K}_k^T (\mathbf{y}_m - \mathbf{y}_s(\mathbf{X}_{k-1})), \quad (1.28)$$

где \mathbf{K}_k – матрица Якоби, рассчитанная на k -той итерации, \mathbf{E} – единичная матрица.

На рисунке 1.13 показано поле зрения инструмента, покрывающее массив пикселей. В контексте высокого пространственного разрешения современных инструментов можно предложить следующие схемы обработки:

а) пиксели обрабатываются независимо. Концептуально самая простая модель, в которой $\mathbf{y}_m^p \approx \mathbf{y}_s(\mathbf{X}^p)$, где p – индекс пикселя, \mathbf{y}_m^p – измерение в пикселе p , \mathbf{X}^p – параметры модели в пикселе p . Обратная задача решается для каждого пикселя независимо. Недостаток модели заключается в том, что значение общего содержания озона в текущем пикселе никак не соотносится со значениями в соседних пикселях. Предположение о существовании корреляции между соседними пикселями, как правило, повышает точность решения обратной задачи. Для решения задачи оптимизации используется метод Гаусса-Ньютона [167–169].

б) совместная обработка пикселей в поле зрения инструмента. В этом подходе обратная задача решается для массива пикселей. При этом исходят из того, что

⁹В этом случае регуляризационный член имеет вид $\|\mathbf{L}(\mathbf{X} - \mathbf{X}_a)\|^2$, где \mathbf{L} – корреляционная матрица. Он часто применяется, например, при восстановлении функциональных зависимостей, когда желательно, чтобы элементы вектора \mathbf{X} образовывали гладкую функцию.

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}_m^1 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_m^p \\ \vdots \\ \mathbf{y}_m^N \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} \mathbf{y}_s(\mathbf{X}^1) \\ \vdots \\ \mathbf{y}_s(\mathbf{X}^p) \\ \vdots \\ \mathbf{y}_s(\mathbf{X}^N) \end{bmatrix}. \quad (1.29)$$

Тогда соответствующий минимизируемый функционал имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} \left(\begin{bmatrix} \mathbf{X}^1 \\ \vdots \\ \mathbf{X}^p \\ \vdots \\ \mathbf{X}^N \end{bmatrix} \right) &= \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{y}_m^1 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_m^p \\ \vdots \\ \mathbf{y}_m^N \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{y}_s(\mathbf{X}^1) \\ \vdots \\ \mathbf{y}_s(\mathbf{X}^p) \\ \vdots \\ \mathbf{y}_s(\mathbf{X}^N) \end{bmatrix} \right\|^2 \\ &+ \alpha \left\| \begin{bmatrix} L_1 & \cdots & L_{p,1} & \cdots & L_{N,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{1,p} & \cdots & L_p & \cdots & L_{N,p} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{1,N} & \cdots & L_{p,N} & \cdots & L_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}^1 - \mathbf{X}_a^1 \\ \vdots \\ \mathbf{X}^p - \mathbf{X}_a^p \\ \vdots \\ \mathbf{X}^N - \mathbf{X}_a^N \end{bmatrix} \right\|^2 \rightarrow \min. \end{aligned} \quad (1.30)$$

Наличие регуляризационной матрицы должно приводить к тому, что чем больше будет разница в \mathbf{X} у соседних пикселей, тем больше будет функционал. Соответственно, решения в соседних пикселях будут согласованы. Как отмечено в [170], совместная обработка пикселей улучшает стабильность алгоритма. Поиск минимума $\mathcal{F}(\mathbf{X})$ может осуществляться, например, с помощью метода сопряженных градиентов [171].

в) статистическая обработка пикселей. В этом случае обратная задача решается для усредненного вектора $\overline{\mathbf{X}}$ и его моментов $\overline{\mathbf{X}}^i$, $i = 2, 3, \dots$ и т.д. «Исходными данными» в этом случае являются среднее значение $\overline{\mathbf{y}}_m$ и соответствующие моменты $\overline{\mathbf{y}}_m^i$, $i = 2, 3, \dots$. Пока такой подход не получил широкого распространения из-за недостаточно хорошо развитой стохастической теории переноса излучения для задач DOAS.

1.5.3 Учет аппаратной функции

Если на входное отверстие измерительного прибора поступает монохромный сигнал $\delta(\lambda_0)$, то прибор регистрирует некое распределение $S(\lambda - \lambda_0)$, называемое аппаратной функцией (slit function) [172, 173]. Она зависит от характеристик прибора (например, от размеров входной щели детектора, наличия хроматических aberrаций и шумов матрицы детектора). Поэтому для аккуратного моделирования измерений рассчитанный сигнал сворачивают с аппаратной функцией:

$$I(\lambda_0) = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} S(\lambda - \lambda_0) I_s(\lambda) d\lambda, \quad (1.31)$$

где λ_{\min} и λ_{\max} обозначают минимальное и максимальное значения длины волны, соответственно. Расчет тонкой структуры спектра $I_s(\lambda)$ должен производиться с мелким шагом по λ . Такой подход получил название line-by-line. Основной его недостаток – трудоемкость, обусловленная многократным вызовом солвера уравнения переноса.

В результате свертки тонкая структура расчетного спектра загроубляется. Альтернативный подход заключается в вычислении спектра при эффективном сечении поглощения σ_a^{eff} , равной свертки «истинного» сечения поглощения σ_a с аппаратной функцией:

$$\sigma_a^{\text{eff}}(\lambda_0) = \int_{\lambda_{\min}}^{\lambda_{\max}} S(\lambda - \lambda_0) \sigma_a(\lambda) d\lambda. \quad (1.32)$$

Такой метод является менее точным и приводит к существенным ошибкам при расчете в инфракрасной области. Однако в полосе Хюггинса использование эффективных сечений хорошо себя зарекомендовало, так как позволяет рассчитывать спектр с разрешением, равным разрешению спектрометра [46].

1.6 Учет горизонтально-неоднородной облачности в задачах дистанционного зондирования

1.6.1 Квазиодномерные модели

Моделирование и учет неоднородностей среды в пределах одного пикселя является одной из основных проблем восстановления содержания газов при измерениях в надир. Влияние неоднородности облаков увеличивается с ростом пространственного разрешения [174]. В [175] учет влияния облаков осуществлен в диффузионном приближении.

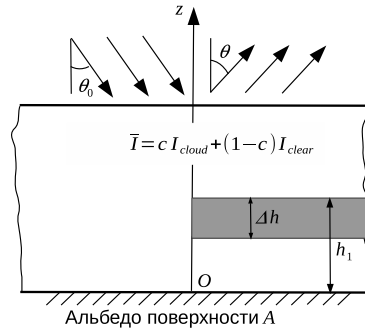


Рисунок 1.14 — Иллюстрация модели независимых пикселей (модели внешнего смешивания): h_1 — высота верхней границы облака, Δh — геометрическая толщина облака.

Большинство алгоритмов определения послойного состава атмосферы основано на приближении независимых пикселей (*Independent pixel approximation* (IPA)) [176–178]. Для каждого пикселя решается одномерная задача. В силу своей простоты и высокой скорости счета приближение используется в большинстве операционных процессоров. Для модели атмосферы, включающей облако, вводят параметр облачности c (*cloud fraction*) [179, 180]. Он показывает долю пикселя на спутниковом снимке, покрытую облаком. Расчет яркости для такого пикселя производится в так называемой модели внешнего смешивания или сокращенно ЕММ (от англ. *external mixing model*): средняя яркость пикселя равна линейной комбинации яркостей для чистого неба ($c = 0$) I_{clear} и для неба, полностью покрытого облаком ($c = 1$) I_{cloud} (см. рисунок 1.14):

$$I = (1 - c)I_{\text{clear}} + cI_{\text{cloud}}. \quad (1.33)$$

При этом облако описывается однородным плоскопараллельным слоем. Данная модель требует решения уравнения переноса для двух случаев, что обуславливает её высокую скорость обработки. Однако при малой горизонтальной протяженности облака, как показано в [181], ошибка IPA может достигать 30 %. Поэтому для обработки данных нового поколения сенсоров для Sentinel-4,-5P,-5 [182] требуются более точные модели, учитывающие неоднородность облаков.

Альтернативой модели внешнего смешивания является модель внутреннего смешивания [183]. В ней горизонтально неоднородный слой заменяется однородным слоем с эффективными параметрами, такими что решение уравнения для «гомогенизированного» слоя было бы максимально приближено к решению трехмерного уравнения. Фактически, модель внутреннего смешивания является параметризацией трехмерной модели. В данной диссертации моделям внешнего и внутреннего смешивания будет дано обоснование, они будут получены из

стохастической теории, описанной ниже, и апробированы на основе многомерного алгоритма SHDOM.

Отметим, что операционные алгоритмы для GOME, SCIAMACHY и GOME-2 построены на достаточно грубой модели, в которой отражение от облака описывается на основе закона Ламберта без строгого учета процессов многократного рассеяния в облаке. Такое приближение хорошо работает для оптически толстых, но геометрически тонких облаков (что бывает редко). Облако описывается параметром облачности c , положением верхней границы облака H и альбедо A . Эти параметры определяются по спектрам поглощения кислорода (Oxygen A-band) квази-эмпирически. Например, в алгоритме ICFA (Initial Cloud Fitting Algorithm) [184] восстанавливается только c , в то время как H берется из климатологической базы данных, а A облака предполагается равным 0.8. В алгоритме FRESCO (Fast Retrieval Scheme for Clouds from the Oxygen A-band) [185] определяются два первых параметра при фиксированном значении альбедо 0.8. Только в 2014 году появилась работа [186], в которой облака рассматриваются как однородные слои (clouds-as-layers (CAL) approach). Было установлено, что измерения в полосе поглощения кислорода позволяют восстановить H вместе с оптической толщиной или вместе c (но не все три сразу).

1.6.2 Стохастические модели

Реальное облако является трехмерной неоднородной рассеивающей средой. Для нового поколения инструментов дистанционного зондирования с высоким пространственным разрешением (Sentinel 5 Precursor, Sentinel 4, Sentinel 5 [182]) необходимо учитывать неоднородность облака в рамках пикселя и влияние неоднородности облака на функцию яркости, а также на результат обращения. Строго говоря, такой учет без привлечения дополнительной информации о структуре облака может быть только вероятностным, так как точная структура облака не известна. В лучшем случае можно считать заданными некоторые статистические характеристики облака, речь о которых пойдет в Главе 4. В этой связи можно сформулировать две вычислительные стратегии для определения поля яркости и её статистических моментов. Первая стратегия основана на многомерных детерминистических моделях переноса и включает следующие шаги:

1. моделирование выборки случайных реализаций неоднородного облака;
2. решение уравнения переноса для каждой реализации;
3. усреднение полученных решений по ансамблю реализаций.

Для каждой реализации неоднородного облака необходимо решить трехмерную задачу или методом Монте-Карло [56], или детерминистическими алгоритмами типа SHDOM [187]. В обоих случаях 3D-расчеты очень трудоемки. Из-за вычислительной сложности такая стратегия не может быть использована в операционных алгоритмах.

В рамках второй стратегии облако рассматривается как стохастическая неоднородная рассеивающая среда. Перенос излучения описывается с помощью специальных стохастических моделей переноса, в которых используются новые уравнения переноса, связывающие статистические параметры облака и поля яркости (например, флуктуации яркости). Вторая стратегия также содержит три шага:

1. моделирование выборки случайных реализаций неоднородного облака;
2. получение необходимой статистической информации из набора реализаций облака;
3. решение стохастического уравнения переноса, используя в качестве исходных данных статистические параметры облака, полученные на предыдущем шаге.

Тем самым, можно избежать трудоемких расчетов в трехмерной модели. Понятно, что стохастические модели менее точные, чем трехмерные, однако являются хорошим компромиссом между точностью и скоростью вычислений. Несмотря на очевидные преимущества такого подхода, стохастические модели до сих пор не используются в операционных алгоритмах. Этому есть как минимум два объяснения. Во-первых, до сих пор не было потребности их использовать в режиме near-real-time, а переход к стохастическим моделям требует соответствующие изменения и в сторонних алгоритмах (например, алгоритме определения параметров облака). Во-вторых, не было достаточно быстрых алгоритмов решения одномерных задач и вычислительных мощностей. Использование стохастической модели в операционных алгоритмах описано в Главе 6 данной диссертации.

Стохастическая теория переноса излучения развивалась в работах Л.С. Долина [188], В.Л. Вебера [189], А.Г. Лучинина [190] и других. Методы вычисления среднего поля яркости от произвольной стохастической среде можно разделить на две группы. Первая группа основана на алгоритме Монте-Карло для среды, в которой некоторые оптические параметры являются случайными функциями. Чтобы свести к минимуму вычислительные затраты, случайная структура облака моделируется вместе с траекторией фотонов. Такой подход развивается в работах Б.М.Каргина [191] и С.М. Пригарина [192]. Этот метод оказался очень эффективным для прямого моделирования, в частности, для вычисления поля яркости в случае разорванной облачности.

Наше внимание будет сфокусировано на второй группе методов, в которых к уравнению переноса излучения применяется аналитическая процедура статистического усреднения. Стохастическая модель для анализа яркости в средах со случайными пространственными флуктуациями оптических свойств была изучена в работе [193]. С помощью метода статистического осреднения модель была сведена к системе уравнений для статистических моментов яркости излучения. Предложенная техника применима для произвольной горизонтально однородной статистики среды. В системе уравнений фигурируют ковариационные слагаемые высоких порядков. Основная проблема заключается в замыкании системы. В [193] система была решена методом итераций в предположении о том, что флуктуации оптических свойств среды описываются гауссовой статистикой.

Для теоретического и численного исследования полезной оказалась модель разорванной облачности (*broken clouds*). В ней среда описывается как бинарная «смесь»: в однородном компоненте «чистое небо» есть неоднородный компонент «облако». Распределение облака описывают случайной функцией f от координат, принимающей значение $f = 0$ (ясное небо) или $f = 1$ (небо с облаком). При этом предполагается что макромасштабные флуктуации оптических параметров, благодаря стохастической геометрии облачного поля, являются более сильными по сравнению с аналогичными флуктуациями, обусловленными случайной внутренней структурой облаков (см. главу 6 монографии [43]). В субтропиках и тропиках доля разорванной облачности может достигать 30-50%. Главное преимущество модели заключается в возможности получить замкнутую систему уравнений. Первый успешный расчет для разорванной облачности был проведен О.А. Авасте и Г.М. Вайникко [194]. Полученные Г.М. Вайникко [195, 196] и О.А. Авасте результаты показали принципиальную возможность вывода из стохастического уравнения переноса замкнутых уравнений для моментов яркости.

Перенос излучения в случае разорванной облачности может быть описан с помощью двух связанных интегро-дифференциальных уравнений Levermore-Pomraning. Первое уравнение записывается для средней яркости облака, второе – для средней яркости ясного неба. Вывод уравнений Levermore-Pomraning, приведенный в [197–201], был основан на теории альтернирующих процессов восстановления [202]. Метод, применимый к бинарным смесям с произвольной статистикой, приведен в работе [203]. В нем записываются уравнения баланса частиц в каждом материале, которые затем усредняются по ансамблю всевозможных статистических реализаций. Существуют также альтернативные подходы, основанные на предположении о нескоррелированности траекторий частиц [204] и методе шума ядерного реактора [205]. Имея дело с уравнениями Levermore-Pomraning, мы сталкиваемся с проблемой замыкания,

так как уравнения для «объемных» средних яркостей включают также и интенсивности на границе между облачным небом и ясным небом. В модели Levermore замыкание выполняется в предположении о том, что эти яркости равны. Такая модель является точной для чисто поглощающих сред с марковской статистикой и приближенной для рассеивающих сред и/или сред с немарковской статистикой. Более точная модель для немарковской статистики получена в работе [198].

Уравнения Levermore-Pomraning можно решить в предположении горизонтальной инвариантности статистических характеристик облака. В этом случае они сводятся к системе двух одномерных интегро-дифференциальных уравнений. Далее предполагается изотропное рассеяние и выполняется разложение в ряд Фурье. Система уравнений решается для нулевой азимутальной гармоники, то есть рассчитывается яркость, усредненная по азимуту. Решение производится с помощью метода дискретных ординат в сочетании с техникой итераций [206, 207]. Заметим, что стохастическая модель Анисимова-Фукшанского, основанная на уравнениях Levermore-Pomraning, формулируется для полной яркости.

Для диффузной компоненты марковская модель облака с двумя связанными интегральными уравнениями была предложена Г.А. Титовым [208, 209]. В ней ясное небо считается полностью прозрачным. Математически такая модель идентична дифференциальной модели Levermore [206]. Обобщение модели на случай многослойных облаков с неоднородной марковской статистикой было выполнено Е.Касьяновым [210]. Статистически неоднородная рассеивающая среда была представлена как набор статистически однородных слоев облака, каждый из которых однороден вдоль вертикального направления, но неоднороден вдоль горизонтальных направлений. Полученные интегральные уравнения для средней яркости были решены методом Монте-Карло и моделированием марковских цепей. Включение в модель отражения от поверхности, рассеяния и поглощения солнечного излучения аэрозолями и атмосферными газами было выполнено Г.А.Титовым, Т.Б.Журавлевой и В.Е.Зуевым [211]. В заключении этой части заметим, что помимо приближения разорванной облачности очень продуктивным оказалось допущение о марковской статистике. Последнее позволяет замкнуть систему с помощью значений средних длин хорд областей с облаком и без него, легко определяемых экспериментально (см, например, [212])).

В Главе 4 данной диссертации будет приведен анализ стохастического уравнения переноса, построена стохастическая модель для рассеянного солнечного излучения с учетом подстилающей поверхности. Модель позволяет рассчитывать усредненные значения яркости на верхней границе атмосферы для восстановления атмосферного озона.

1.6.3 Многомерные модели

Для систем, не обладающих симметрией, приходится решать уравнение переноса в трехмерном случае. Аналитические методы решения основаны на разбиении пространства на контрольные объемы и нахождении связи между функциями яркости на границах контрольных объемов. Впервые для сферической модели итерационный метод характеристик был реализован Т.А.Сушкевич [213]. Одним из широко используемым в атмосферных задачах методом является SHDOM (Spherical Harmonics Discrete Ordinate method), разработанный К.Ф. Evans¹⁰ [187]. Уравнение переноса решается итерационно с помощью метода сферических гармоник и метода дискретных ординат. Каждая итерация состоит из четырех шагов:

1. переход от представления функции источников через сферические гармоники к представлению через дискретные ординаты;
2. интегрирование функции источников вдоль направлений, соответствующих дискретным ординатам и расчет яркости, выраженной с помощью дискретных ординат;
3. переход от представления яркости через дискретные ординаты к сферическим гармоникам;
4. расчет функции источников через яркости в пространстве сферических гармоник.

В коде SHDOM реализовано построение адаптивной сетки. Она повышает точность расчета благодаря уменьшению шага дискретизации по пространству в тех областях, где функция источников быстро меняется. При этом адаптивная сетка повышает точность интегрирования функции источников, а точность интерполяции яркости и функции источников определяется шагом дискретизации. Основой SHDOM является разностная схема, которая используется для расчета яркости вдоль дискретных ординат.

Разностные схемы могут быть условно поделены на три группы [214]: характеристические, интегро-интерполяционные и конечных элементов. Так, SHDOM использует характеристические схемы, код RADUGA основан на интегро-интерполяционных схемах [215], в коде EVENT реализована схема конечных элементов [216]. Характеристические схемы используют интегральную форму уравнения переноса для расчета функции яркости в каждой точке сетки. Если интегрирование производится вдоль всей характеристики дифференциального оператора, то такой метод называется методом длинных характеристик (the long

¹⁰<http://nit.colorado.edu/shdom.html>

characteristic method). Если же интегрирование производится только внутри ячейки, тогда говорят о методе коротких характеристик (the short characteristic method).

Реализации метода коротких характеристик можно разделить на две категории. Представителями первой категории методов являются метод Латропа (Lathrop) [217], характеристическая схема Вендорфа (Wendroff) [218] и характеристическая схема Вуда-Карлсона (Woods–Carlson) [219], в которых предполагается, что коэффициент экстинкции и функция источников имеют постоянные значения по всей ячейке. В работе [220] описан линейный метод характеристик, в котором функция источников меняется линейно в ячейке. При этом функция источников выражается через среднее значение в центре ячейки и линейный градиент, посчитанный через скалярные потоки в каждом угле. В работе [221] функция источников аппроксимируется полиномом второй степени, коэффициенты которого определяются средними значениями функции источников в текущей ячейке и двух соседних ячейках. Все эти методы используют так называемое уравнение баланса, получаемое путем интегрирования уравнения переноса по объему ячейки. Схемы, в которых выполняется уравнение баланса для потоков, называются консервативными. В них для расчетной ячейки существует аналитическая связь между входящими и выходящими потоками.

Вторая категория методов коротких характеристик называется схемами узловых точек (corner-point schemes) [222, 223]. В них предполагается, что яркость и функция источников меняются линейно вдоль границы ячейки, а также что функция источников меняется линейно вдоль характеристики. В работе [224] предполагалось, что функция источников меняется параболически вдоль характеристики. Коэффициенты параболы определялись из значений функции источников в узловых точках ячейки и в точках пересечения характеристики с границами расчетной и смежной ячеек. Однако для метода узловых точек отсутствует уравнение баланса, так как схема не использует усредненные по границе ячейки значения яркости. Поэтому сохранение потока не гарантировано.

В коде SHDOM используются схемы коротких и длинных характеристик. Чтобы уменьшить ошибку интерполяции яркости на границе ячейки, характеристика продолжается назад через несколько ячеек до тех пор, пока коэффициент пропускания не станет меньше некоего критического значения. Для точек, не расположенных на горизонтальных границах используется схема коротких характеристик (предполагается, что среда облучается сверху или снизу). При этом предполагается, что коэффициент экстинкции и произведение коэффициента экстинкции на функцию источников меняются линейно вдоль характеристики. Для расчета яркости в узлах сетки используется очень нетривиальная формула, которая является точ-

ной для небольших оптических толщин и для любых оптических толщин при постоянном коэффициенте экстинкции.

Альтернативой детерминистическим методам, таким как SHDOM, являются методы Монте-Карло. Априорно сделать выбор в пользу одного из двух семейств трудно: в зависимости от геометрии и набора определяемых параметров детерминистические методы могут быть как лучше, так и хуже метода Монте-Карло. Согласно утверждению автора SHDOM, «[SHDOM] cannot handle all modeling situations, and Monte Carlo methods are often superior». Проблемы у SHDOM возникают, если оптическая толщина вдоль стороны ячейки больше 1, что приводит к необходимости создания расчетной сетки с более мелким шагом и, как следствие, к росту времени счета (к кубическому росту в случае трехмерной модели). Также, если необходимо определить небольшое число параметров, которые являются средними величинами (например, суммарный поток на верхней границе атмосферы), то методы Монте-Карло могут быть более точными и быстрыми, чем SHDOM. В то же время, если требуется вычислить угловое распределение яркости на границе атмосферы в нескольких точках, то использование детерминистических методов предпочтительней. Детальное сравнение SHDOM и кода Монте-Карло I3RC [225] проведено в работах [226, 227]. Также следует помнить, что при решении обратных задач нужен и якобиан решения. При нахождении производных по параметрам, не влияющим на геометрию среды, код Монте-Карло может быть эффективно линеаризован и искомые производные могут быть посчитаны, исходя из уже набранной статистики для решения [228]. Однако дифференцирование кода по параметрам, определяющим геометрию, не столь эффективно.

Говоря о трехмерных моделях, учитывающих поляризацию, отметим, что, как и в одномерном случае, распространение получили детерминистические модели, основанные на аналитическом решении уравнения переноса, и модели, основанные на методе Монте-Карло. К первому семейству относятся декартова модель Haferman et al. [229] и сферическая модель Emde et al. [230]. Представителями второго семейства являются модели Roberti & Kummerow [231], Liou et al. [232], и Emde et al. [233]. Все детерминистические методы основаны на разностных схемах малого порядка для вычисления вектора Стокса вдоль направлений дискретных ординат. В [229] используется схема нулевого порядка; в [230] используется метод коротких характеристик с постоянными матрицей экстинкции и функцией источников вдоль характеристики. В обоих моделях расчет производится на основной сетке (без адаптивной сетки). Как уже было отмечено, две основные особенности – (1) комбинирование представления яркости с помощью дискретных ординат и сферических гармоник и (2) адаптивная сет-

ка – делают SHDOM очень эффективным кодом. Однако в векторных трехмерных моделях эти техники до настоящего момента не были реализованы. А главное, не созданы линеаризованные многомерные алгоритмы для расчета матрицы Якоби. Построению эффективной векторной многомерной модели, а также линеаризации SHDOM посвящена Глава 5.

В контексте вышесказанного отметим, что можно выделить два принципиально разных типа алгоритмов, востребованных в миссиях Sentinel 4, 5-P, 5. Первый тип алгоритмов нацелен на решение уравнения переноса в режиме реального времени. Основное требование, предъявляемое к ним, это скорость счета. Модель расчета может быть упрощена и сведена к одномерной. Второй тип алгоритмов не предназначен для использования в операционных процессорах, но необходим для верификации одномерной модели в условиях высокого пространственного разрешения. Методы, основанные на стохастической теории, занимают промежуточное положение между одномерными и многомерными алгоритмами по скорости счета и точности модели и являются компромиссным вариантом.

1.7 Влияние различных факторов на точность моделирования сигнала отраженного излучения в полосе Хюггинса

Результаты анализа, проведенного в Главе 1, суммируем в Таблице 1.3. В ней приведены факторы, влияющие на точность моделирования сигнала в полосе Хюггинса, ориентировочные возможные ошибки, обусловленные указанными факторами, а также способы уменьшить их влияние. Заметим, что из отмеченных факторов все кроме неоднородной облачности учитывались в операционных алгоритмах.

Результаты Главы 1

Основной целью Главы 1 было дать описание проблем, которые должны быть решены для нового поколения инструментов дистанционного зондирования Sentinel 4, 5-p, 5. Отметим наиболее существенные положения:

1. Высокое пространственное разрешение планируемых миссий дистанционного зондирования в сочетании с требованием обработки данных в режиме реального времени приводят к задаче создания быстрых алгоритмов решения задач теории переноса излучения.

Таблица 1.3 — Факторы, влияющие на точность моделирования сигнала в полосе Хюггинса

Фактор	Возможная ошибка в яркости	Возможные решения
Упругое рассеяние	20%	Учет многократного рассеяния с помощью решения уравнения переноса
Неупругое рассеяние (эффект Ринга)	10%	Учет псевдопоглотителей с помощью спектральной коррекции (1.23)
Поляризация	10%	Спектральная коррекция (1.25)
Альбедо поверхности	10%	Модели внешнего или внутреннего замыкания
Тропосферный аэрозоль	10%	Модель внутреннего замыкания
Стратосферный аэрозоль	10%	Определение параметров аэрозоля альтернативными методами в отсутствие облачности
Микрофизические параметры аэрозоля и облака	5%	Использование климатологических баз данных и классов
Неоднородная облачность	30%	Использование модели стохастической облачности
Анизотропное рассеяние	5%	Дельта-М метод, TMS-коррекция, малоугловая модификация MCG
Расчет матрицы Якоби	5%	Аналитическое дифференцирование вместо метода конечных разностей

2. Для решения обратных задач требуются алгоритмы, которые должны не только рассчитывать яркость рассеянного излучения по заданным параметрам среды, но также рассчитывать и производные от решения по искомым параметрам. Наиболее эффективным способом построения линеаризованной модели является аналитическое дифференцирование расчетного кода.
3. Алгоритм решения уравнения переноса, построенный на аналитическом выделении анизотропной части на основе малоуглового приближения, позволяет не прибегать к методам усечения индикатрис при сохранении высокой скорости счета. Однако он должен быть адаптирован для используемых расчетных моделей, в частности, учитывающих сферичность атмосферы.
4. В контексте планируемых миссий Sentinel 4, 5-р, 5 необходимо развитие стохастической модели переноса излучения в атмосфере с неоднородным облаком и многомерных алгоритмов для оценки ошибки одномерных моделей, в частности, широко используемого приближения независимых пикселей.

ГЛАВА 2. Решение прямой монохроматической задачи

*"You're bound to be unhappy if you
optimize everything"*

Donald Ervin Knuth (Создатель
системы \TeX)

2.1 Существование и единственность решения дискретизованного уравнения переноса

В этом разделе мы дадим конструктивное доказательство существования решения дискретизованного уравнения переноса, и докажем его единственность на базе метода матричной экспоненты.

2.1.1 Дискретизация уравнения переноса и матричная формулировка

Уравнение переноса излучения для однородного плоскопараллельного слоя, облучаемого под углом $\mathbf{\Omega}_0 = (-\mu_0, \varphi_0)$, где $\mu_0 > 0$ – косинус зенитного угла падения, а φ_0 – азимутальный угол падения, имеет вид

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_a(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0)}{d\tau} &= I_a(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0) - \frac{\omega}{4\pi} F_0 p(\mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0) e^{-\tau/\mu_0} \\ &- \frac{\omega}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 p(\mu, \mu', \varphi - \varphi') I_a(\tau, \mu', -\mu_0 \varphi' - \varphi_0) d\mu' d\varphi', \end{aligned} \quad (2.1)$$

где $I_a(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0)$ – диффузионная часть яркости на глубине τ в направлении, определяемом косинусом зенитного угла μ и азимутальным углом φ , $p(\mu, \mu', \varphi - \varphi')$ – индикатриса рассеяния $\mathbf{\Omega}' = (\mu', \varphi') \rightarrow \mathbf{\Omega} = (\mu, \varphi)$, ω – альбеда однократного рассеяния, F_0 – падающий поток. Уравнение для полной яркости

$$I(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0) = I_a(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0) + I_\odot(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0)$$

совпадает с уравнением (2.1), в котором нет предпоследнего слагаемого, а прямое солнечное излучение I_\odot

$$I_\odot(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0) = F_0 \delta(\mu + \mu_0) \delta(\varphi - \varphi_0) e^{-\tau/\mu_0},$$

является решением уравнения

$$\mu \frac{dI_\odot}{d\tau}(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0) = I_\odot(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0).$$

С помощью разложения Фурье

$$p(\mu, \mu', \varphi - \varphi') = \sum_{m=0}^{2N-1} (2 - \delta_{m0}) p_m(\mu, \mu') \cos[m(\varphi - \varphi')], \quad (2.2)$$

$$I_d(\tau, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0) = \sum_{m=0}^{2N-1} I_{dm}(\tau, \mu, -\mu_0) \cos[m(\varphi - \varphi_0)], \quad (2.3)$$

уравнение (2.1) сводится к уравнению для азимутальных гармоник:

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_{dm}(\tau, \mu, -\mu_0)}{d\tau} &= I_{dm}(\tau, \mu, -\mu_0) - (2 - \delta_{m0}) \frac{\omega}{4\pi} F_0 p_m(\mu, -\mu_0) e^{-\tau/\mu_0} \\ &\quad - \frac{1}{2} \omega \int p_m(\mu, \mu') I_{dm}(\tau, \mu', -\mu_0) d\mu'. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Для удобства записи далее мы опустим индекс m . Интеграл в (2.4) заменяется квадратурой Гаусса-Лежандра с N узлами $\{\mu_k\}_{k=1}^N \subset (0, 1)$ и соответствующими весами w_k . В результате получим неоднородное дифференциальное уравнение для вектора-столба $\mathbf{i}_d = [\mathbf{i}_d^+, \mathbf{i}_d^-]^T$, где $\mathbf{i}_d^\pm = [I_{dm}(\pm\mu_k, -\mu_0)]$, $k = 1, \dots, N$:

$$\frac{d\mathbf{i}_d}{d\tau}(\tau) = -\mathbf{A}\mathbf{i}_d(\tau) - \mathbf{b}e^{-\tau/\mu_0}. \quad (2.5)$$

Матрица слоя \mathbf{A} полностью описывает рассеивающие свойства среды текущего слоя и имеет вид

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{11} & \mathbf{A}^{12} \\ -\mathbf{A}^{12} & -\mathbf{A}^{11} \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

где

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^{11} &= \mathbf{M}\mathbf{S}^+\mathbf{W} - \mathbf{M}, \\ \mathbf{A}^{12} &= \mathbf{M}\mathbf{S}^-\mathbf{W}.\end{aligned}\tag{2.7}$$

Вектор-столбец \mathbf{b} имеет вид

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}^1 \\ \mathbf{b}^2 \end{bmatrix},\tag{2.8}$$

где

$$\begin{aligned}\mathbf{b}^1 &= \mathbf{M}\mathbf{b}^+, \\ \mathbf{b}^2 &= -\mathbf{M}\mathbf{b}^-, \end{aligned}\tag{2.9}$$

и

$$[\mathbf{S}^\pm]_{kl} = \frac{1}{2}\omega p_m(\mu_k, \pm\mu_l),\tag{2.10}$$

$$[\mathbf{W}]_{kl} = w_k\delta_{kl},\tag{2.11}$$

$$[\mathbf{M}]_{kl} = \frac{1}{\mu_k}\delta_{kl},\tag{2.12}$$

$$[\mathbf{b}^\pm]_k = (2 - \delta_{m0})\frac{F_0}{4\pi}\omega p_m(\pm\mu_k, -\mu_0),\tag{2.13}$$

для $k, l = 1, \dots, N$, а δ_{kl} — дельта Кронекера. Далее, следуя работам Waterman [234], Nakajima&Tanaka [235] и Stamnes&Swanson [236], применим масштабное преобразование

$$\widehat{\mathbf{i}}_d^\pm = \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}\mathbf{M}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{i}_d^\pm\tag{2.14}$$

и перейдем к $\widehat{\mathbf{i}}_d = [\widehat{\mathbf{i}}_d^+, \widehat{\mathbf{i}}_d^-]^T$. Подробнее свойства преобразования (2.14) будут рассмотрены в части 2.3.1. Для $\widehat{\mathbf{i}}_d$ имеем

$$\frac{d\widehat{\mathbf{i}}_d}{d\tau}(\tau) = -\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{i}}_d(\tau) - \widehat{\mathbf{b}}e^{-\tau/\mu_0},\tag{2.15}$$

где $\widehat{\mathbf{A}}$ и $\widehat{\mathbf{b}}$ имеют структуру, аналогичную (2.6) и (2.8), соответственно, причем

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{A}}^{11} &= \mathbf{M}^{\frac{1}{2}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}(\mathbf{S}^+ - \mathbf{W}^{-1})\mathbf{M}^{\frac{1}{2}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}, \\ \widehat{\mathbf{A}}^{12} &= \mathbf{M}^{\frac{1}{2}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}\mathbf{S}^-\mathbf{M}^{\frac{1}{2}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}},\end{aligned}\tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{b}}^1 &= \mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{b}^+, \\ \widehat{\mathbf{b}}^2 &= -\mathbf{M}^{\frac{1}{2}} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{b}^-. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Из принципа оптической взаимности следует \mathbf{S}^+ и \mathbf{S}^- симметричны. Откуда легко убедиться, что $\widehat{\mathbf{A}}^{11}$ и $\widehat{\mathbf{A}}^{12}$ также симметричны.

Формальное решение уравнения (2.15) при граничном условии $\widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{d}}(0)$ имеет вид:

$$\widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{d}}(\tau) = e^{-\widehat{\mathbf{A}}\tau} \widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{d}}(0) - \int_0^\tau e^{-\widehat{\mathbf{A}}(\tau-\tau')} e^{-\tau'/\mu_0} \widehat{\mathbf{b}} d\tau'. \quad (2.18)$$

Далее рассмотрим

$$\int_0^\tau e^{-\widehat{\mathbf{A}}(\tau-\tau')} e^{-\tau'/\mu_0} \widehat{\mathbf{b}} d\tau' = (e^{-\widehat{\mathbf{A}}\tau} - e^{-\tau/\mu_0} \mathbf{I}) \mu_0 (\mathbf{I} - \mu_0 \widehat{\mathbf{A}})^{-1} \widehat{\mathbf{b}}, \quad (2.19)$$

и, введя

$$\widehat{\mathbf{c}} = \mu_0 (\mathbf{I} - \mu_0 \widehat{\mathbf{A}})^{-1} \widehat{\mathbf{b}}, \quad (2.20)$$

перепишем (2.18) в виде

$$\widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{d}}(\tau) = e^{-\widehat{\mathbf{A}}\tau} [\widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{d}}(0) - \widehat{\mathbf{c}}] + \widehat{\mathbf{c}} e^{-\tau/\mu_0}. \quad (2.21)$$

Решение уравнения (2.15) можно представить в виде суммы решения однородного уравнения и частного неоднородного, т.е.

$$\widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{d}}(\tau) = \widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{h}}(\tau) + \widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{p}}(\tau). \quad (2.22)$$

Частное решение уравнения (2.15) имеет вид

$$\widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{p}}(\tau) = \widehat{\mathbf{c}} e^{-\tau/\mu_0}, \quad (2.23)$$

где $\widehat{\mathbf{c}}$ дается соотношением (2.20). Однородное уравнение имеет вид

$$\frac{d\widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{h}}}{d\tau}(\tau) = -\widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{h}}(\tau), \quad (2.24)$$

с решением

$$\widehat{\mathbf{i}}_{\mathbf{h}}(\tau) = e^{-\widehat{\mathbf{A}}\tau} \widehat{\mathbf{c}}_{\mathbf{h}}. \quad (2.25)$$

Вектор $\widehat{\mathbf{c}}_h$ получается из рассмотрения граничного условия для (2.22): $\widehat{\mathbf{c}}_h = \widehat{\mathbf{i}}_d(0) - \widehat{\mathbf{c}}$. Далее, из (2.22), (2.23) и (2.25) найдем эквивалентное представление для (2.21):

$$\widehat{\mathbf{i}}_d(\tau) = e^{-\widehat{\mathbf{A}}\tau}[\widehat{\mathbf{i}}_d(0) - \widehat{\mathbf{i}}_p(0)] + \widehat{\mathbf{i}}_p(\tau). \quad (2.26)$$

Заметим, что полная яркость $\widehat{\mathbf{i}}(\tau) = \widehat{\mathbf{i}}_d(\tau) + \widehat{\mathbf{i}}_\odot(\tau)$ является решением уравнения (2.24), также как и $\widehat{\mathbf{i}}_h$. Откуда $\widehat{\mathbf{i}}_h(\tau) = \widehat{\mathbf{i}}(\tau)$. Прямое солнечное излучение $\widehat{\mathbf{i}}_\odot(\tau) = \widehat{\mathbf{i}}_\odot(0) \exp(-\tau/\mu_0)$ является решением для $\mu_0 d\widehat{\mathbf{i}}_\odot(\tau)/d\tau = -\widehat{\mathbf{i}}_\odot(\tau)$, откуда $\widehat{\mathbf{i}}_\odot(\tau) = -\widehat{\mathbf{i}}_p(\tau)$.

2.1.2 Спектральное разложение матрицы слоя

Матричная экспонента может быть рассчитана с помощью спектрального разложения матрицы $\widehat{\mathbf{A}}$. В силу блочной симметрии разложение имеет вид

$$\widehat{\mathbf{A}} = \widehat{\mathbf{V}} \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{\Lambda} \end{bmatrix} \widehat{\mathbf{V}}^{-1}, \quad (2.27)$$

где

$$\widehat{\mathbf{V}} = \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{V}}_+ & \widehat{\mathbf{V}}_- \\ \widehat{\mathbf{V}}_- & \widehat{\mathbf{V}}_+ \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{\Lambda} = \text{diag}[\lambda_1, \dots, \lambda_N] \stackrel{\text{not}}{=} [\lambda_k]. \quad (2.29)$$

Спектральное разложение матрицы $\widehat{\mathbf{A}}$ может быть получено одним из трех методов: разложение асимметричной матрицы [236], «square-root» разложение [235] и разложение Холецкого [237]. В (2.28) матрицы $\widehat{\mathbf{V}}_\pm$ вид

$$\widehat{\mathbf{V}}_\pm = [\widehat{\mathbf{v}}_1^\pm, \dots, \widehat{\mathbf{v}}_N^\pm] \stackrel{\text{not}}{=} [\widehat{\mathbf{v}}_k^\pm],$$

где $\begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{v}}_k^+ & \widehat{\mathbf{v}}_k^- \end{bmatrix}^T$ – правые собственные векторы матрицы $\widehat{\mathbf{A}}$, соответствующие собственному значению λ_k , а $\begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{v}}_k^- & \widehat{\mathbf{v}}_k^+ \end{bmatrix}^T$ – правые собственные векторы матрицы $\widehat{\mathbf{A}}$, соответствующие собственному значению $-\lambda_k$. Тогда матричная экспонента записывается в виде

$$e^{-\widehat{\mathbf{A}}\tau} = \widehat{\mathbf{V}} \begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}(\tau) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{\Gamma}(-\tau) \end{bmatrix} \widehat{\mathbf{V}}^{-1}, \quad (2.30)$$

$$\mathbf{\Gamma}(\tau) = [e^{-\lambda_k \tau}]. \quad (2.31)$$

Далее нам понадобятся соотношения (они доказаны в части 2.3.1)

$$\overline{\mathbf{V}}_+^T \overline{\mathbf{V}}_-^{-T} = \widehat{\mathbf{V}}_-^{-1} \widehat{\mathbf{V}}_+, \quad (2.32)$$

$$\overline{\mathbf{V}}_-^{-T} \overline{\mathbf{V}}_+^T = \widehat{\mathbf{V}}_+ \widehat{\mathbf{V}}_-^{-1}, \quad (2.33)$$

$$\overline{\mathbf{V}}_-^{-T} = \widehat{\mathbf{V}}_- - \widehat{\mathbf{V}}_+ \widehat{\mathbf{V}}_-^{-1} \widehat{\mathbf{V}}_+. \quad (2.34)$$

2.1.3 Метод дискретных ординат с матричной экспонентой

Метод дискретных ординат с матричной экспонентой основан на концепции уравнения слоя, которое связывает яркость на верхней границе $\widehat{\mathbf{i}}_d(0)$ с яркостью на нижней границе $\widehat{\mathbf{i}}_d(\tau)$. Уравнение слоя следует из (2.18):

$$\mathbf{D}_1(\tau) \overline{\mathbf{V}}^T \widehat{\mathbf{i}}_d(\tau) = \mathbf{D}_0(\tau) \overline{\mathbf{V}}^T \widehat{\mathbf{i}}_d(0) - \mathbf{D}_b(\tau) \overline{\mathbf{V}}^T \widehat{\mathbf{b}}, \quad (2.35)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_1(\tau) &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_N & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{\Gamma}(\tau) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D}_0(\tau) = \begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}(\tau) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_N \end{bmatrix}, \\ \mathbf{D}_b(\tau) &= \begin{bmatrix} \frac{e^{-\lambda_k \tau} - e^{-\tau/\mu_0}}{1/\mu_0 - \lambda_k} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{1 - e^{-\tau(\lambda_k + 1/\mu_0)}}{1/\mu_0 + \lambda_k} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Если $\widehat{\mathbf{i}}_d(0)$ и $\widehat{\mathbf{i}}_d(\tau)$ известны, решение внутри слоя в точке τ' , $0 \leq \tau' \leq \tau$, имеет вид:

$$\widehat{\mathbf{i}}_d(\tau') = \widehat{\mathbf{V}} \mathbf{E}(\tau', \tau) \begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}_+(0) \\ \boldsymbol{\xi}_-(\tau) \end{bmatrix} - \widehat{\mathbf{V}} \mathbf{E}_b(\tau', \tau) \boldsymbol{\eta}, \quad (2.37)$$

где $\boldsymbol{\xi}_{\pm}(\tau) = \overline{\mathbf{V}}^T \widehat{\mathbf{i}}_d^{\pm}(\tau)$, $\boldsymbol{\eta} = \overline{\mathbf{V}}^T \widehat{\mathbf{b}}$ и

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\tau', \tau) &= \begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}(\tau') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{\Gamma}(\tau - \tau') \end{bmatrix}, \\ \mathbf{E}_b(\tau', \tau) &= \begin{bmatrix} \frac{e^{-\lambda_k \tau'} - e^{-\tau'/\mu_0}}{1/\mu_0 - \lambda_k} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -e^{-\tau'/\mu_0} \frac{1 - e^{-(\tau - \tau')(\lambda_k + 1/\mu_0)}}{1/\mu_0 + \lambda_k} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Отметим, что представление решения через матричную экспоненту (см. уравнение (2.18)) эквивалентно характеристическим решениям Чандрасекара

$$e^{-\lambda_k \tau} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^+ \\ \hat{\mathbf{v}}_k^- \end{bmatrix} \text{ и } e^{\lambda_k \tau} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^- \\ \hat{\mathbf{v}}_k^+ \end{bmatrix}. \quad (2.39)$$

Чтобы показать эту эквивалентность, рассмотрим (2.20)

$$\hat{\mathbf{i}}_d(\tau') = e^{-\hat{\mathbf{A}}\tau'} [\hat{\mathbf{i}}_d(0) - \hat{\mathbf{i}}_p(0)] + \hat{\mathbf{i}}_p(\tau'), \quad (2.40)$$

при $0 \leq \tau' \leq \tau$. Используя (2.30), а также

$$\begin{bmatrix} \Gamma(\tau') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Gamma(-\tau') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Gamma(\tau') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Gamma(-\tau') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Gamma(\tau) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Gamma(\tau) \end{bmatrix}^{-1}, \quad (2.41)$$

имеем

$$\hat{\mathbf{i}}_d(\tau') = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau') & \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau - \tau') \\ \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau') & \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau - \tau') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix} + \hat{\mathbf{i}}_p(\tau'), \quad (2.42)$$

где N -мерные векторы $\boldsymbol{\alpha}$ и $\boldsymbol{\beta}$ не зависят от τ' и имеют вид

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_+ & \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau) \\ \hat{\mathbf{V}}_- & \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau) \end{bmatrix}^{-1} [\hat{\mathbf{i}}_d(0) - \hat{\mathbf{i}}_p(0)]. \quad (2.43)$$

Уравнению (2.42) можно придать вид

$$\hat{\mathbf{i}}_d(\tau') = \sum_{k=1}^N \alpha_k e^{-\lambda_k \tau'} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^+ \\ \hat{\mathbf{v}}_k^- \end{bmatrix} + \beta_k e^{-\lambda_k (\tau - \tau')} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^- \\ \hat{\mathbf{v}}_k^+ \end{bmatrix} + \hat{\mathbf{i}}_p(\tau'), \quad (2.44)$$

что является решением в обычном методе дискретных ординат. Другое представление получается из рассмотрения равенства

$$\begin{bmatrix} \Gamma(\tau') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Gamma(-\tau') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Gamma(\tau') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Gamma(-\tau') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{I} \\ \Gamma(\tau) & \Gamma(\tau) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{I} \\ \Gamma(\tau) & \Gamma(\tau) \end{bmatrix}^{-1}, \quad (2.45)$$

с использованием которого получим

$$\hat{\mathbf{i}}_d(\tau') = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau - \tau') + \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau') & \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau - \tau') - \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau') \\ \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau - \tau') + \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau') & \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau - \tau') - \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau') \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix} + \hat{\mathbf{i}}_p(\tau'), \quad (2.46)$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} \\ \boldsymbol{\beta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau) + \hat{\mathbf{V}}_+ & \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau) - \hat{\mathbf{V}}_+ \\ \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau) + \hat{\mathbf{V}}_- & \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau) - \hat{\mathbf{V}}_- \end{bmatrix}^{-1} [\hat{\mathbf{i}}_d(0) - \hat{\mathbf{i}}_p(0)]. \quad (2.47)$$

Из (2.46) следует, что

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{i}}_d(\tau') = & \sum_{k=1}^N \alpha_k \left(e^{-\lambda_k \tau'} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^+ \\ \hat{\mathbf{v}}_k^- \end{bmatrix} + e^{-\lambda_k(\tau - \tau')} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^- \\ \hat{\mathbf{v}}_k^+ \end{bmatrix} \right) \\ & + \beta_k \left(-e^{-\lambda_k \tau'} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^+ \\ \hat{\mathbf{v}}_k^- \end{bmatrix} + e^{-\lambda_k(\tau - \tau')} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^- \\ \hat{\mathbf{v}}_k^+ \end{bmatrix} \right) + \hat{\mathbf{i}}_p(\tau'), \end{aligned} \quad (2.48)$$

где, как и раньше, константы интегрирования α_k и β_k не зависят от τ' .

В обычном методе дискретных ординат неизвестными являются коэффициенты α_k и β_k , которые находятся из условия непрерывности для яркости на границах слоев. Также требуется обращение матрицы $(\mathbf{I} - \mu_0 \hat{\mathbf{A}})^{-1}$. В методе дискретных ординат с матричной экспонентой неизвестными являются сами значения яркости на границах слоев. Когда они найдены, константы интегрирования могут быть найдены из (2.43) или (2.47). К тому же обращение $(\mathbf{I} - \mu_0 \hat{\mathbf{A}})^{-1}$ не требуется. Заметим, однако, что в обычном методе с использованием преобразования (2.14) вектор $\hat{\mathbf{c}}$ можно рассчитать более эффективно как

$$\hat{\mathbf{c}} = \mu_0 \hat{\mathbf{V}} \begin{bmatrix} (\mathbf{I} - \mu_0 \Lambda)^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{I} + \mu_0 \Lambda)^{-1} \end{bmatrix} \bar{\mathbf{V}}^T \hat{\mathbf{b}} \quad (2.49)$$

при $\mu_0 \neq \mu_k$, $k = 1, \dots, N$.

2.1.4 Матрицы отражения и пропускания для однородного слоя

В задачах дистанционного зондирования мы сталкиваемся с двухточечной краевой задачей, когда задаются решения на верхней границе в нижней полусфере и на нижней границе в верхней полусфере. Одноточечную задачу в методе матричной экспоненты можно свести к двухточечной с помощью матриц отражения и пропускания аналогичных тем, что используются в методе сложения удвоения [238–240] и методе спектральной декомпо-

зиции [60, 76, 235, 241–243]. Далее с помощью последнего получим несколько эквивалентных выражений для матриц отражения и пропускания.

Первое представление получим из уравнения слоя (2.35) с помощью перегруппировки элементов матриц:

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_d^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_d^-(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{R}} & \hat{\mathbf{T}} \\ \hat{\mathbf{T}} & \hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_d^-(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_d^+(\tau) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\Sigma}^+ \\ \hat{\Sigma}^- \end{bmatrix}, \quad (2.50)$$

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{R}} & \hat{\mathbf{T}} \\ \hat{\mathbf{T}} & \hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Gamma(\tau)\bar{\mathbf{V}}_+^T & -\bar{\mathbf{V}}_-^T \\ \bar{\mathbf{V}}_-^T & \Gamma(\tau)\bar{\mathbf{V}}_+^T \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -\Gamma(\tau)\bar{\mathbf{V}}_-^T & -\bar{\mathbf{V}}_+^T \\ \bar{\mathbf{V}}_+^T & \Gamma(\tau)\bar{\mathbf{V}}_-^T \end{bmatrix}, \quad (2.51)$$

$$\begin{bmatrix} \hat{\Sigma}^+ \\ \hat{\Sigma}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Gamma(\tau)\bar{\mathbf{V}}_+^T & -\bar{\mathbf{V}}_-^T \\ \bar{\mathbf{V}}_-^T & \Gamma(\tau)\bar{\mathbf{V}}_+^T \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{D}_b \bar{\mathbf{V}}^T \hat{\mathbf{b}}. \quad (2.52)$$

Из (2.51) очевидно, что расчет $\hat{\mathbf{R}}$ и $\hat{\mathbf{T}}$ требует обращение и умножение матриц размера $2N \times 2N$. Аналогичные выражения без применения преобразования (2.14) были получены в работах В.П.Будака [76] и А.Дойку [60].

Рассмотрим более эффективный способ расчета $\hat{\mathbf{R}}$ и $\hat{\mathbf{T}}$ матриц. Из (2.42)-(2.43) и (2.46)-(2.47) следует, что

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_d^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_d^-(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{R}} & \hat{\mathbf{T}} \\ \hat{\mathbf{T}} & \hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_d^-(0) - \hat{\mathbf{i}}_p^-(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_d^+(\tau) - \hat{\mathbf{i}}_p^+(\tau) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_p^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_p^-(\tau) \end{bmatrix}. \quad (2.53)$$

Для доказательства выразим $\hat{\mathbf{i}}_d(\tau) = [\hat{\mathbf{i}}_d^+(\tau), \hat{\mathbf{i}}_d^-(\tau)]^T$ и $\hat{\mathbf{i}}_d(0) = [\hat{\mathbf{i}}_d^+(0), \hat{\mathbf{i}}_d^-(0)]^T$ с помощью (2.42), где положим $\tau' = \tau$, и (2.43), соответственно. В терминах α и β имеем

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_d^-(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_d^+(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_- & \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau) \\ \hat{\mathbf{V}}_+ \Gamma(\tau) & \hat{\mathbf{V}}_- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_p^-(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_p^+(\tau) \end{bmatrix}, \quad (2.54)$$

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_d^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_d^-(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_+ & \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau) \\ \hat{\mathbf{V}}_- \Gamma(\tau) & \hat{\mathbf{V}}_+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_p^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_p^-(\tau) \end{bmatrix}. \quad (2.55)$$

Далее,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_d^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_d^-(\tau) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_+ & \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma}(\tau) \\ \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma}(\tau) & \hat{\mathbf{V}}_+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{V}}_- & \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(\tau) \\ \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(\tau) & \hat{\mathbf{V}}_- \end{bmatrix}^{-1} \\ &\times \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_d^-(0) - \hat{\mathbf{i}}_p^-(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_d^+(\tau) - \hat{\mathbf{i}}_p^+(\tau) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_p^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_p^-(\tau) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.56)$$

что завершает доказательство.

Используя тождество

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{B} & \mathbf{A} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{C} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{C} \\ -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{C} & \mathbf{C} \end{bmatrix}, \quad (2.57)$$

$$\mathbf{C} = (\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B})^{-1}, \quad (2.58)$$

получим

$$\hat{\mathbf{R}} = (\hat{\mathbf{V}}_+ - \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma} \hat{\mathbf{V}}_-^{-1} \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma})(\hat{\mathbf{V}}_- - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma} \hat{\mathbf{V}}_-^{-1} \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma})^{-1}, \quad (2.59)$$

$$\hat{\mathbf{T}} = (\hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma} - \hat{\mathbf{V}}_+ \hat{\mathbf{V}}_-^{-1} \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma})(\hat{\mathbf{V}}_- - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma} \hat{\mathbf{V}}_-^{-1} \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma})^{-1}, \quad (2.60)$$

где $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma}(\tau)$. Используя другое тождество

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & -\mathbf{B} \\ \mathbf{A} & \mathbf{B} \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{A}^{-1} \\ -\mathbf{B}^{-1} & \mathbf{B}^{-1} \end{bmatrix}, \quad (2.61)$$

получим

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{2}[(\hat{\mathbf{V}}_+ + \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma})(\hat{\mathbf{V}}_- + \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma})^{-1} + (\hat{\mathbf{V}}_+ - \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma})(\hat{\mathbf{V}}_- - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma})^{-1}], \quad (2.62)$$

$$\hat{\mathbf{T}} = \frac{1}{2}[(\hat{\mathbf{V}}_+ + \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma})(\hat{\mathbf{V}}_- + \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma})^{-1} - (\hat{\mathbf{V}}_+ - \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma})(\hat{\mathbf{V}}_- - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma})^{-1}]. \quad (2.63)$$

С помощью алгебраических преобразований можно убедиться, что уравнения (2.59)-(2.60) и (2.62)-(2.63) идентичны. Однако расчет по (2.59)-(2.60) требует 2 обращения и 5 перемножений матриц, а расчет по (2.62)-(2.63) требует 2 обращения и 2 перемножения матриц. Таким образом, для расчета величин в (2.50) необходимо:

1. рассчитать $\hat{\mathbf{R}}$ и $\hat{\mathbf{T}}$, используя (2.62) и (2.63), соответственно,

2. рассчитать частные решения с помощью (2.23) и (2.49) и

$$\begin{bmatrix} \hat{\Sigma}^+ \\ \hat{\Sigma}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_p^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_p^-(\tau) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{R}} & \hat{\mathbf{T}} \\ \hat{\mathbf{T}} & \hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}_p^-(0) \\ \hat{\mathbf{i}}_p^+(\tau) \end{bmatrix}.$$

Рассмотрим соотношение для полной яркости

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}^-(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{R}} & \hat{\mathbf{T}} \\ \hat{\mathbf{T}} & \hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}^-(0) \\ \hat{\mathbf{i}}^+(\tau) \end{bmatrix}, \quad (2.64)$$

откуда

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}^+(\tau) \\ \hat{\mathbf{i}}^-(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{T}}^{-1} & -\hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{R}} \\ \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{T}}^{-1} & \hat{\mathbf{T}} - \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}^-(0) \end{bmatrix}. \quad (2.65)$$

С учетом (2.26) и

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}^+(\tau) \\ \hat{\mathbf{i}}^-(\tau) \end{bmatrix} = e^{-\hat{\mathbf{A}}\tau} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{i}}^+(0) \\ \hat{\mathbf{i}}^-(0) \end{bmatrix}, \quad (2.66)$$

получим, что

$$e^{-\hat{\mathbf{A}}\tau} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{T}}^{-1} & -\hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{R}} \\ \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{T}}^{-1} & \hat{\mathbf{T}} - \hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{T}}^{-1}\hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix}. \quad (2.67)$$

Тогда если $\exp(-\hat{\mathbf{A}}\tau)$ уже известно, то для нахождения $\hat{\mathbf{T}}$ надо обратить верхний левый блок матрицы. Далее для нахождения $\hat{\mathbf{R}}$ достаточно умножить нижний левый блок на $\hat{\mathbf{T}}$. С учетом (2.28) и того, что (см. 2.3.1)

$$e^{-\hat{\mathbf{A}}\tau} = \hat{\mathbf{V}} \begin{bmatrix} \mathbf{\Gamma}(\tau) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{\Gamma}(-\tau) \end{bmatrix} \bar{\mathbf{V}}^T, \quad (2.68)$$

получим

$$\hat{\mathbf{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(\tau) \bar{\mathbf{V}}_+^T + \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma}(-\tau) \bar{\mathbf{V}}_-^T, \quad (2.69)$$

$$\hat{\mathbf{R}}\hat{\mathbf{T}}^{-1} = -\hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma}(\tau) \bar{\mathbf{V}}_+^T + \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(-\tau) \bar{\mathbf{V}}_-^T. \quad (2.70)$$

Уравнения (2.69)-(2.70) использовались Вотерманом для получения асимптотических решений для матриц отражения и пропускания. Мы же покажем их эквивалентность с уравнениями

ями (2.59)-(2.60) и (2.62)-(2.63). Определим

$$\hat{\mathbf{T}}_0 = \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} \mathbf{\Gamma}(\tau) \hat{\mathbf{V}}_-^{-1} \quad (2.71)$$

и рассмотрим матричное произведение

$$\hat{\mathbf{T}}^{-1} \hat{\mathbf{T}}_0 = \mathbf{I} - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(\tau) \bar{\mathbf{V}}_+^T \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} \mathbf{\Gamma}(\tau) \hat{\mathbf{V}}_-^{-1}. \quad (2.72)$$

Откуда получим

$$\hat{\mathbf{T}}_0^{-1} \hat{\mathbf{T}} = [\mathbf{I} - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(\tau) \bar{\mathbf{V}}_+^T \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} \mathbf{\Gamma}(\tau) \hat{\mathbf{V}}_-^{-1}]^{-1}, \quad (2.73)$$

$$\hat{\mathbf{T}} = \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} \mathbf{\Gamma}(\hat{\mathbf{V}}_- - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma} \bar{\mathbf{V}}_+^T \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} \mathbf{\Gamma})^{-1}, \quad (2.74)$$

$$\hat{\mathbf{R}} = (\hat{\mathbf{V}}_+ - \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma} \bar{\mathbf{V}}_+^T \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} \mathbf{\Gamma})(\hat{\mathbf{V}}_- - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma} \bar{\mathbf{V}}_+^T \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} \mathbf{\Gamma})^{-1}. \quad (2.75)$$

Используя соотношения (2.32) и (2.34) в (2.74)-(2.75), получаем в точности уравнения (2.59)-(2.60).

2.1.5 Уравнение Риккати

Bellman et al. [244] свел задачу о переносе излучения к решению системы из двух нелинейных матричных дифференциальных уравнений (уравнений Риккати), которые описывают матрицы отражения и пропускания. Так как вывод, приведенный Bellman et al. основан на методе инвариантного погружения, в некоторых работах инвариантное погружение используется как синоним матричных уравнений Риккати. Однако в работах Waterman [234] и Flatau & Stephens [245] показано, что матричные уравнения Риккати получаются в рамках формализма матричной экспоненты. Рассмотрим

$$\frac{d(e^{-\hat{\mathbf{A}}\tau})}{d\tau} = -\hat{\mathbf{A}}e^{-\hat{\mathbf{A}}\tau}, \quad (2.76)$$

$$\frac{d}{d\tau} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{T}}^{-1} & -\hat{\mathbf{T}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \\ \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{T}}^{-1} & \hat{\mathbf{T}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{T}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{A}}^{11} & \hat{\mathbf{A}}^{12} \\ -\hat{\mathbf{A}}^{12} & -\hat{\mathbf{A}}^{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{T}}^{-1} & -\hat{\mathbf{T}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \\ \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{T}}^{-1} & \hat{\mathbf{T}} - \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{T}}^{-1} \hat{\mathbf{R}} \end{bmatrix},$$

откуда получим 4 уравнения Риккати:

$$\frac{d}{d\tau} \hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{A}}^{12} + \hat{\mathbf{A}}^{11} \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{A}}^{11} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{A}}^{12} \hat{\mathbf{R}}, \quad (2.77)$$

$$\frac{d}{d\tau} \hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{A}}^{11} \hat{\mathbf{T}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{A}}^{12} \hat{\mathbf{T}}, \quad (2.78)$$

и

$$\frac{d}{d\tau} \hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{A}}^{12} \hat{\mathbf{T}}, \quad (2.79)$$

$$\frac{d}{d\tau} \hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{A}}^{11} + \hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{A}}^{12} \hat{\mathbf{R}}. \quad (2.80)$$

Из (2.77)-(2.80) следуют равенства

$$\hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{A}}^{12} \hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{A}}^{12} + \hat{\mathbf{A}}^{11} \hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{A}}^{11} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{A}}^{12} \hat{\mathbf{R}}, \quad (2.81)$$

$$\hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{A}}^{11} + \hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{A}}^{12} \hat{\mathbf{R}} = \hat{\mathbf{A}}^{11} \hat{\mathbf{T}} + \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{A}}^{12} \hat{\mathbf{T}}. \quad (2.82)$$

Для вывода граничных условий для (2.77) и (2.78), положим $\tau \rightarrow 0$ в (2.67); из $\lim_{\tau \rightarrow 0} \exp(-\hat{\mathbf{A}}\tau) = \mathbf{I}_{2N}$ получим

$$\hat{\mathbf{R}}(0) = 0, \quad (2.83)$$

$$\hat{\mathbf{T}}(0) = \mathbf{I}_N. \quad (2.84)$$

Из (2.77) и (2.78) очевидно, что уравнение (2.77) может быть решено независимо для $\hat{\mathbf{R}}$, а уравнение (2.78) должно быть решено совместно с (2.77) для того, чтобы найти $\hat{\mathbf{T}}$.

Завершим секцию 2.1 тем, что покажем эквивалентность между матричным уравнением Риккати и методом спектральной декомпозиции для расчета матрицы отражения. Граничная задача (2.77), (2.83) эквивалентна следующей краевой задаче из $2n$ линейных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \begin{bmatrix} \mathcal{P}(\tau) \\ \mathcal{Q}(\tau) \end{bmatrix} &= - \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{A}}^{11} & \hat{\mathbf{A}}^{12} \\ -\hat{\mathbf{A}}^{12} & -\hat{\mathbf{A}}^{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{P}(\tau) \\ \mathcal{Q}(\tau) \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} \mathcal{P}(0) \\ \mathcal{Q}(0) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_N \\ 0 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.85)$$

$$\hat{\mathbf{R}}(\tau) = \mathcal{Q}(\tau) \mathcal{P}^{-1}(\tau). \quad (2.86)$$

Сделаем замену переменных

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathcal{P}}(\tau) \\ \hat{\mathcal{Q}}(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\bar{\mathbf{V}}_+^T & \bar{\mathbf{V}}_-^T \\ \bar{\mathbf{V}}_-^T & -\bar{\mathbf{V}}_+^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{P}(\tau) \\ \mathcal{Q}(\tau) \end{bmatrix}, \quad (2.87)$$

уравнение (2.85) переписывается в виде

$$\frac{d}{d\tau} \begin{bmatrix} \hat{\mathcal{P}}(\tau) \\ \hat{\mathcal{Q}}(\tau) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{\Lambda} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\mathcal{P}}(\tau) \\ \hat{\mathcal{Q}}(\tau) \end{bmatrix}, \quad (2.88)$$

с граничным условием

$$\begin{bmatrix} \hat{\mathcal{P}}(0) \\ \hat{\mathcal{Q}}(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\bar{\mathbf{V}}_+^T \\ \bar{\mathbf{V}}_-^T \end{bmatrix}. \quad (2.89)$$

В терминах $\hat{\mathcal{P}}$ и $\hat{\mathcal{Q}}$ матрица отражения записывается как

$$\hat{\mathbf{R}}(\tau) = [\hat{\mathbf{V}}_- \hat{\mathcal{P}}(\tau) \hat{\mathcal{Q}}^{-1}(\tau) + \hat{\mathbf{V}}_+][\hat{\mathbf{V}}_+ \hat{\mathcal{P}}(\tau) \hat{\mathcal{Q}}^{-1}(\tau) + \hat{\mathbf{V}}_-]^{-1}. \quad (2.90)$$

Решение уравнения (2.88) есть $\hat{\mathcal{P}}(\tau) = [e^{-\lambda_k \tau}] \hat{\mathcal{P}}(0)$ и $\hat{\mathcal{Q}}(\tau) = [e^{\lambda_k \tau}] \hat{\mathcal{Q}}(0)$. Поэтому матричное произведение $\hat{\mathcal{P}}(\tau) \hat{\mathcal{Q}}^{-1}(\tau)$ в (2.90) выражается как

$$\hat{\mathcal{P}}(\tau) \hat{\mathcal{Q}}^{-1}(\tau) = \mathbf{\Gamma}(\tau) \hat{\mathcal{P}}(0) \hat{\mathcal{Q}}^{-1}(0) \mathbf{\Gamma}(\tau) = -\mathbf{\Gamma}(\tau) \bar{\mathbf{V}}_+^T \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} \mathbf{\Gamma}(\tau). \quad (2.91)$$

Используя равенство (см. (2.32)) $\bar{\mathbf{V}}_+^T \bar{\mathbf{V}}_-^{-T} = \hat{\mathbf{V}}_-^{-1} \hat{\mathbf{V}}_+$ в (2.91) и подставив результирующее выражение в (2.90), получим

$$\hat{\mathbf{R}}(\tau) = [\hat{\mathbf{V}}_+ - \hat{\mathbf{V}}_- \mathbf{\Gamma}(\tau) \hat{\mathbf{V}}_-^{-1} \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(\tau)][\hat{\mathbf{V}}_- - \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(\tau) \hat{\mathbf{V}}_-^{-1} \hat{\mathbf{V}}_+ \mathbf{\Gamma}(\tau)]^{-1}, \quad (2.92)$$

что в точности повторяет уравнение (2.59). Таким образом, формализм уравнений Риккати и метод спектрального разложения приводят к одному и тому же выражению для матрицы отражения.

Главный вывод нашего анализа состоит в том, после выделения анизотропной части решения дискретизованное уравнения переноса для плоского слоя имеет единственное аналитическое решение в матричной форме. Следовательно пути ускорения алгоритма следует

искать в оптимальном выделении анизотропной части рассеяния и пост-обработке (методе итераций).

2.2 Малоугловая модификация метода дискретных ординат в псевдосферической модели атмосферы

Идея ускорения решения уравнения переноса за счет выделения анизотропной части на основе малоуглового приближения была сформулирована и развивалась в работах В.П.Будака [72, 246, 247]. В традиционном подходе решение I представляется в виде суммы сингулярной нерассеянной компоненты I_{sun} и диффузионной части I_{d} . В модифицированном методе решение представляется в виде суммы анизотропной части I_{a} , рассчитанной на основе малоуглового приближения, и гладкой регулярной части I_{r} . При этом все сингулярности содержатся в анизотропной части:

$$I = I_{\text{sun}} + I_{\text{d}} = I_{\text{a}} + I_{\text{r}}. \quad (2.93)$$

На основе этого подхода были созданы радиационные коды MDOM и MVDOM¹ для плоско-параллельной геометрии. Ниже рассмотрены обобщение MDOM на псевдосферическую геометрию, линеаризация метода дискретных ординат с малоугловой модификацией, а также иные способы ускорения расчета. Псевдосферическая модель учитывает то, что солнечный луч проходит в атмосфере путь меньший, чем в плоско-параллельной модели, как показано на рисунке 2.1. Соответственно, I_{sun} рассчитывается с учетом сферичности атмосферы, а I_{d} – в плоско-параллельной. Целью дальнейших выкладок является реализация метода MDOM в псевдо-сферической геометрии.

2.2.1 Математическая формулировка

Рассмотрим краевую задачу для уравнения переноса для полной яркости $I(r, \Omega)$ в плоско-параллельной геометрии с ламбертовской подложкой для плоского мононаправленного источника:

¹<http://svetmpei.ru/entry/2010/03/23/mvdom-software-release>

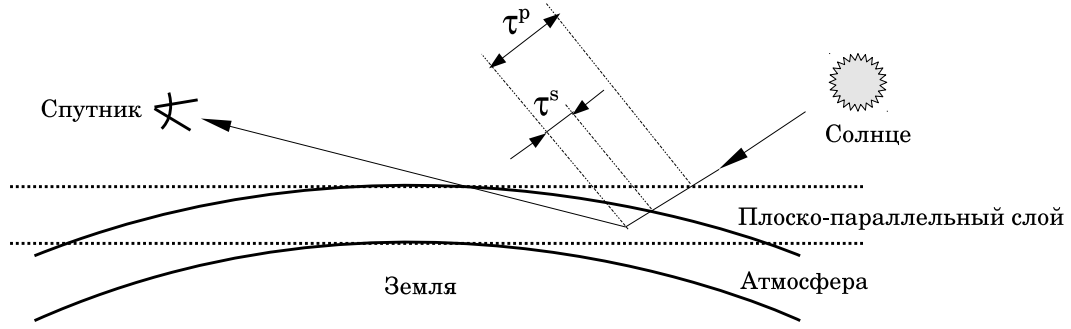


Рисунок 2.1 — Иллюстрация псевдо-сферической модели. Солнечный луч до сильного рассеяния проходит путь τ^s , однако в плоско-параллельной модели проходит путь $\tau^p > \tau^s$.

$$\begin{cases} \mu \frac{dI}{dr}(r, \Omega) = -\sigma_{\text{ext}}(r) I(r, \Omega) + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') I(r, \Omega') d\Omega', \\ I(r_{\text{TOA}}, \mu < 0, \varphi) = F_{\text{sun}} \delta(\mu + \mu_0) \delta(\varphi - \varphi_0), \\ I(r_s, \mu > 0, \varphi) = \frac{A}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 I(r_s, -\mu, \varphi) \mu d\mu d\varphi. \end{cases} \quad (2.94)$$

где σ_{ext} и σ_{sct} — коэффициенты экстинкции и рассеяния, соответственно; F_{sun} — падающий солнечный поток; P — индикатриса рассеяния; A — альбедо поверхности. r_{TOA} и r_s обозначают координаты верхней границы атмосферы и подложки, соответственно. Направление Ω определяется косинусом зенитного угла $\mu = \cos \theta$ и азимутальным углом φ . Считаем, что $\mu > 0$ для восходящего потока, $\mu < 0$ для нисходящего потока. Солнечный поток падает в направлении $\Omega_0 = (\sqrt{1 - \mu_0^2} \cos \varphi_0, \sqrt{1 - \mu_0^2} \sin \varphi_0, -\mu_0)$, $\mu_0 > 0$. Краевая задача, записанная для нерассеянной компоненты солнечного излучения $I_{\text{sun}}(r, \Omega)$, имеет вид:

$$\begin{cases} \mu \frac{dI_{\text{sun}}}{dr}(r, \Omega) = -\sigma_{\text{ext}}(r) I_{\text{sun}}(r, \Omega), \\ I_{\text{sun}}(r_{\text{TOA}}, \mu, \varphi) = F_{\text{sun}} \delta(\mu + \mu_0) \delta(\varphi - \varphi_0), \end{cases} \quad (2.95)$$

Решение краевой задачи может быть записано как

$$\begin{aligned} I_{\text{sun}}(r, \Omega) &= F_{\text{sun}} \mathcal{T}_p(r) \delta(\mu + \mu_0) \delta(\varphi - \varphi_0) \\ &= \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \mathcal{T}_p(r) \sum_{n,m} (2 - \delta_{m0}) P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0) \cos[m(\varphi - \varphi_0)], \end{aligned} \quad (2.96)$$

где $\mathcal{T}_p(r)$ — функция пропускания между верхней границей атмосферы и точкой с координатой r

$$\mathcal{T}_p(r) = \exp \left[-\frac{1}{\mu_0} \int_r^{r_{\text{TOA}}} \sigma_{\text{ext}}(r') dr' \right], \quad (2.97)$$

$(1/\mu_0) \int_r^{r_{\text{TOA}}} \sigma_{\text{ext}}(r') \, dr'$ – путь, пройденный лучем из точки r_{TOA} в точку r , измеренный в оптических толщинах, P_n^m – присоединенные полиномы Лежандра, индекс “p” обозначает «plane-parallel». Также используется обозначение $\sum_{n,m} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n$.

2.2.2 Решение для анизотропной части в плоско-параллельной геометрии

Аналитическое решение для анизотропной части аналогично решению Гаудсмита-Саундерсена [248]. Краевая задача для анизотропной части яркости I_{a} схожа с (2.94), но в левой части уравнения μ заменен на μ_0 [76, 80, 249]:

$$\begin{cases} -\mu_0 \frac{dI_{\text{a}}}{dr}(r, \Omega) = -\sigma_{\text{ext}}(r) I_{\text{a}}(r, \Omega) + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') I_{\text{a}}(r, \Omega') \, d\Omega', \\ I_{\text{a}}(r_{\text{TOA}}, \mu, \varphi) = F_{\text{sun}} \delta(\mu + \mu_0) \delta(\varphi - \varphi_0). \end{cases} \quad (2.98)$$

Решение краевой задачи имеет вид:

$$I_{\text{a}}(r, \Omega) = \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \sum_{n,m} (2 - \delta_{m0}) \mathcal{T}_n^{\text{p}}(r) P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0) \cos[m(\varphi - \varphi_0)], \quad (2.99)$$

где

$$\mathcal{T}_n^{\text{p}}(r) = \exp \left[-\frac{1}{\mu_0} \int_r^{r_{\text{TOA}}} \left(\sigma_{\text{ext}}(r') - \frac{1}{2} \sigma_{\text{sct}}(r') \chi_n(r') \right) dr' \right],$$

и χ_n – коэффициенты разложения индикатрисы рассеяния по нормализованным полиномам Лежандра P_n . Краевые задачи (2.95) и (2.98) сформулированы для полубесконечной среды.

Решение (2.99) содержит сингулярность из-за присутствия нерассеянной компоненты I_{sun} . Для численного расчета анизотропной части сингулярное слагаемое необходимо вычесть

$$\Delta I_{\text{a}} = I_{\text{a}} - I_{\text{sun}}. \quad (2.100)$$

Подставляя (2.96) и (2.99) в (2.100), получим:

$$\begin{aligned} \Delta I_{\text{a}}(r, \Omega) &= \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \sum_{n,m} (2 - \delta_{m0}) [\mathcal{T}_n^{\text{p}}(r) - \mathcal{T}_{\text{p}}(r)] \\ &\times P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0) \cos[m(\varphi - \varphi_0)]. \end{aligned} \quad (2.101)$$

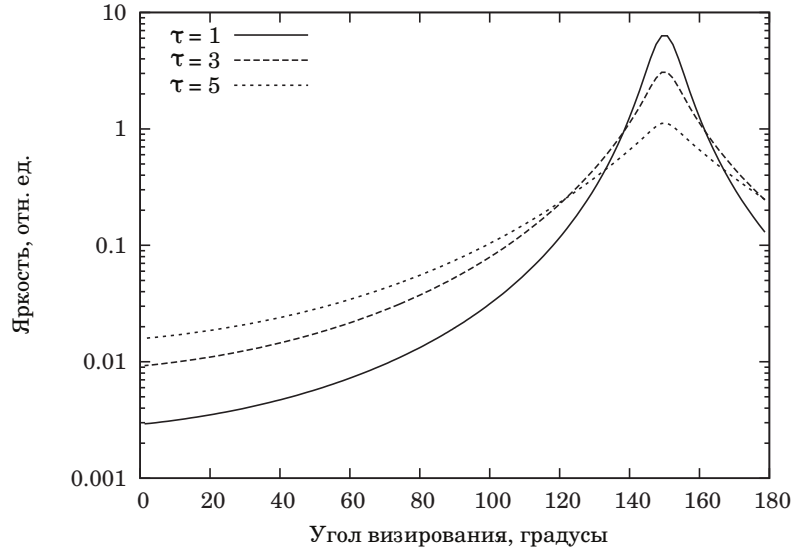


Рисунок 2.2 — Анизотропная часть решения как функция угла визирования при разных значениях оптической толщины слоя. Угол падения $\theta_0 = 30^\circ$.

Из (2.101) и $\mathcal{T}_n^p(r_{\text{тоА}}) = \mathcal{T}_p(r_{\text{тоА}}) = 1$ следует, что на верхней границе атмосферы $\Delta I_a(r_{\text{тоА}}, \mu, \varphi) = 0$.

На рисунках 2.2 и 2.3 показана зависимость анизотропной части I_a от угла визирования при углах падения 30° и 60° , соответственно. Важно то, что при достаточно больших оптических толщинах и углах падения значения $I_a(\mu > 0)$ могут быть сопоставимы с $I_a(\mu < 0)$. Следовательно, анизотропной частью нельзя пренебрегать при постановке нижних граничных условий для I_r .

2.2.3 Гладкая часть решения в псевдо-сферической модели

Из (2.93) следует, что регулярная часть решения может быть выражена как разница между диффузионной частью и анизотропной частью без нерассеянной компоненты,

$$I_r = I_d - (I_a - I_{\text{sun}}) = I_d - \Delta I_a. \quad (2.102)$$

Также мы считаем, что для псевдо-сферической геометрии справедливо

$$I_r^s = I_d^s - \Delta I_a^s \approx I_d^s - \Delta I_a^p, \quad (2.103)$$

где верхний индекс “s” обозначает принадлежность к псевдо-сферической геометрии. Выражение (2.103) показывает, что диффузионная часть вычисляется в псевдо-сферической модели, а анизотропная часть вычисляется в плоско-параллельной модели. Это допущение

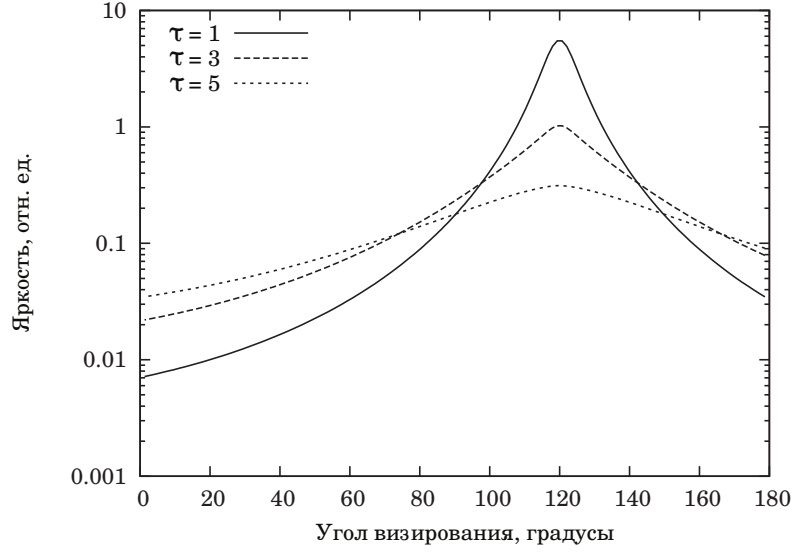


Рисунок 2.3 — Анизотропная часть решения как функция угла визирования при разных значениях оптической толщины слоя. Угол падения $\theta_0 = 60^\circ$.

обращается в строгое равенство на верхней границе атмосферы, так как $\Delta I_a^s(r_{\text{тоА}}, \mu, \varphi) = \Delta I_a^p(r_{\text{тоА}}, \mu, \varphi) = 0$. Важным следствием этого является равенство регулярной и диффузионной частей решения на верхней границе атмосферы, то есть $I_r^s(r_{\text{тоА}}, \mu, \varphi) = I_d^s(r_{\text{тоА}}, \mu, \varphi)$. Поэтому далее, для упрощения обозначений, мы не будем использовать верхние индексы “s” и “p” в выражениях для яркости: диффузионная и регулярная части рассчитываются в псевдо-сферической геометрии, а анизотропная часть – в плоскопараллельной.

Уравнение переноса в псевдо-сферической геометрии имеет вид

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_d}{dr}(r, \Omega) = & -\sigma_{\text{ext}}(r) I_d(r, \Omega) + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} F_{\text{sun}} P(r, \Omega, \Omega_0) \mathcal{T}_s(r) \\ & + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') I_d(r, \Omega') d\Omega', \end{aligned} \quad (2.104)$$

где функция пропускания \mathcal{T}_s рассчитывается в сферической геометрии. Подставляя (2.102) в (2.104), получаем

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_r}{dr}(r, \Omega) = & -\sigma_{\text{ext}}(r) I_r(r, \Omega) + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} F_{\text{sun}} P(r, \Omega, \Omega_0) \mathcal{T}_s(r) \\ & + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') I_r(r, \Omega') d\Omega' + \Delta \mathcal{B}_a(r, \Omega) \end{aligned} \quad (2.105)$$

с дополнительной функцией источников $\Delta\mathcal{B}_a$

$$\begin{aligned}\Delta\mathcal{B}_a(r, \Omega) = & -\mu \frac{d\Delta I_a}{dr}(r, \Omega) - \sigma_{\text{ext}}(r) \Delta I_a(r, \Omega) \\ & + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') \Delta I_a(r, \Omega') d\Omega'.\end{aligned}\quad (2.106)$$

Уравнение для I_r (2.105) аналогично уравнению переноса для I_a в псевдо-сферической геометрии, но с дополнительной функцией источников $\Delta\mathcal{B}_a(r, \Omega)$, обусловленной анизотропной частью решения ΔI_a .

Получим аналитическое выражение для $\Delta\mathcal{B}_a$. Используя (2.101) и разложение индикатрисы рассеяния по полиномам Лежандра

$$P(r, \Omega, \Omega') = \sum_{n,m} (2 - \delta_{m0}) \chi_n(r) P_n^m(\mu) P_n^m(\mu') \cos[m(\varphi - \varphi')], \quad (2.107)$$

интеграл рассеяния можно переписать как

$$\begin{aligned}& \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') \Delta I_a(r, \Omega') d\Omega' \\ &= \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{2} \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \sum_{n,m} (2 - \delta_{m0}) [\mathcal{T}_n^p(r) - \mathcal{T}_p(r)] \\ &\times \chi_n(r) P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0) \cos[m(\varphi - \varphi_0)],\end{aligned}$$

и производная ΔI_a имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{d\Delta I_a}{dr}(r, \Omega) = & \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \sum_{n,m} (2 - \delta_{m0}) \left\{ \frac{1}{\mu_0} \left[\sigma_{\text{ext}}(r) - \frac{1}{2} \sigma_{\text{sct}}(r) \chi_n(r) \right] \mathcal{T}_n^p(r) \right. \\ & \left. - \frac{1}{\mu_0} \sigma_{\text{ext}}(r) \mathcal{T}_p(r) \right\} P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0) \cos[m(\varphi - \varphi_0)].\end{aligned}$$

Подставляя эти выражения в (2.106), мы получаем разложение в ряд Фурье для $\Delta\mathcal{B}_a$:

$$\Delta\mathcal{B}_a(r, \Omega) = \sum_{m \geq 0} (2 - \delta_{m0}) \Delta\mathcal{B}_m^a(r, \mu) \cos[m(\varphi - \varphi_0)],$$

где азимутальные гармоники $\Delta\mathcal{B}_m^a$ вычисляются как

$$\Delta\mathcal{B}_m^a(r, \mu) = \sum_{n \geq m} \Psi_{mn}^1(r, \mu) \mathcal{T}_p(r) - \Psi_{mn}^2(r, \mu) \mathcal{T}_n^p(r), \quad (2.108)$$

а вспомогательные функции Ψ_{mn}^1 и Ψ_{mn}^2 имеют вид

$$\Psi_{mn}^1(r, \mu) = \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \left\{ \frac{\mu}{\mu_0} \sigma_{\text{ext}}(r) + \left[\sigma_{\text{ext}}(r) - \frac{1}{2} \sigma_{\text{sct}}(r) \chi_n(r) \right] \right\} P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0),$$

$$\Psi_{mn}^2(r, \mu) = \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \left(1 + \frac{\mu}{\mu_0} \right) \left[\sigma_{\text{ext}}(r) - \frac{1}{2} \sigma_{\text{sct}}(r) \chi_n(r) \right] P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0).$$

На верхней границе атмосферы граничное условие имеет вид

$$I_{\text{r}}(r_{\text{TOA}}, \mu < 0, \varphi) = I_{\text{d}}(r_{\text{TOA}}, \mu < 0, \varphi) = 0.$$

Для формулирования граничного условия для регулярной части в случае ламбертовской подложки рассмотрим граничное условие для диффузионной части,

$$I_{\text{d}}(r_{\text{s}}, \mu > 0, \varphi) = \frac{A}{\pi} F_{\text{sun}} |\mu_0| \mathcal{T}_{\text{s}}(r_{\text{s}}) + \frac{A}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 I_{\text{d}}(r_{\text{s}}, -\mu, \varphi) \mu \, d\mu d\varphi,$$

и учтем, что анизотропное решение существует и для верхней полусферы

$$\begin{aligned} I_{\text{r}}(r_{\text{s}}, \mu > 0, \varphi) &= \frac{A}{\pi} F_{\text{sun}} |\mu_0| \mathcal{T}_{\text{s}}(r_{\text{s}}) + \frac{A}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 I_{\text{r}}(r_{\text{s}}, -\mu, \varphi) \mu \, d\mu d\varphi \\ &+ \frac{A}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \Delta I_{\text{a}}(r_{\text{s}}, -\mu, \varphi) \mu \, d\mu d\varphi - \Delta I_{\text{a}}(r_{\text{s}}, \mu > 0, \varphi). \end{aligned}$$

Альтернативная формулировка уравнения переноса может быть получена, если разделить в (2.106) вклады от анизотропной и нерассеянной компонент

$$\Delta \mathcal{B}_{\text{a}}(r, \Omega) = \mathcal{B}_{\text{a}}(r, \Omega) - \mathcal{B}_{\text{sun}}(r, \Omega), \quad (2.109)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\text{a}}(r, \Omega) &= \sum_{m \geq 0} (2 - \delta_{m0}) \mathcal{B}_m^{\text{a}}(r, \mu) \cos[m(\varphi - \varphi_0)], \\ \mathcal{B}_m^{\text{a}}(r, \mu) &= - \sum_{n \geq m} \Psi_{mn}^2(r, \mu) \mathcal{T}_n^{\text{p}}(r), \end{aligned}$$

и

$$\mathcal{B}_{\text{sun}}(r, \Omega) = \sum_{m \geq 0} (2 - \delta_{m0}) \mathcal{B}_m^{\text{sun}}(r, \mu) \cos[m(\varphi - \varphi_0)], \quad (2.110)$$

$$\mathcal{B}_m^{\text{sun}}(r, \mu) = - \sum_{n \geq m} \Psi_{mn}^1(r, \mu) \mathcal{T}_p(r).$$

Уравнение 2.110 является разложением в ряд функции источников от нерассеянной компоненты излучения

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\text{sun}}(r, \Omega) = & -\mu \frac{dI_{\text{sun}}}{dr}(r, \Omega) - \sigma_{\text{ext}}(r) I_{\text{sun}}(r, \Omega) \\ & + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') I_{\text{sun}}(r, \Omega') d\Omega'. \end{aligned}$$

Тогда, принимая во внимание то, что I_{sun} является решением граничной задачи (2.95), мы получаем эквивалентное выражение для \mathcal{B}_{sun} :

$$\mathcal{B}_{\text{sun}}(r, \Omega) = \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} F_{\text{sun}} P(r, \Omega, \Omega_0) \mathcal{T}_p(r). \quad (2.111)$$

Используя (2.109) и (2.111), получим уравнение переноса для регулярной части (2.105):

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_r}{dr}(r, \Omega) = & -\sigma_{\text{ext}}(r) I_r(r, \Omega) + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') I_r(r, \Omega') d\Omega' \\ & + \mathcal{B}_a(r, \Omega) + \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} F_{\text{sun}} P(r, \Omega, \Omega_0) [\mathcal{T}_s(r) - \mathcal{T}_p(r)]. \end{aligned} \quad (2.112)$$

Уравнение (2.112) похоже на уравнение для регулярной части в плоско-параллельной геометрии, но содержит дополнительное поправочное слагаемое.

Стоит заметить, что обе формулировки (2.105) и (2.112) эквивалентны, пока в (2.110) \mathcal{B}_{sun} представляется в виде бесконечного ряда. Если ряд конечен (в численных расчетах), то формулировки (2.105) и (2.112) различны. В формулировке (2.105) вклад от нерассеянной компоненты \mathcal{B}_{sun} вычтен не полностью из \mathcal{B}_a из-за обрыва ряда. В формулировке (2.112) вклад нерассеянного излучения полностью вычтен, так как выполнен аналитически.

2.2.4 Решение для многослойной среды

Уравнение для однородного слоя было получено в секции 2.1. Матрица слоя остается неизменной, а вектор слоя (источник) объединяет вклады от нерассеянной компоненты излучения и анизотропной части яркости

$$\mathbf{b}_m(r) = \mathbf{b}_m^{\text{sun}}(r) \mathcal{T}_s(r) + \mathbf{b}_m^{\text{a}}(r),$$

где

$$[\mathbf{b}_m^{\text{sun}\pm}(r)]_k = \pm \frac{1}{\mu_k} (2 - \delta_{m0}) \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} F_{\text{sun}} p_m(r, \pm\mu_k, -\mu_0).$$

Вклад анизотропной части выражается через ряд из $N_{\text{rank}}^{\text{a}} \geq N_{\text{rank}}$ коэффициентов разложения,

$$\mathbf{b}_m^{\text{a}}(r) = \sum_{n=m}^{N_{\text{rank}}^{\text{a}}} \mathbf{b}_{mn}^{\text{a1}}(r) \mathcal{T}_p(r) - \mathbf{b}_{mn}^{\text{a2}}(r) \mathcal{T}_n^p(r),$$

где

$$[\mathbf{b}_{mn}^{\text{a1}\pm}(r)]_k = \pm \frac{1}{\mu_k} (2 - \delta_{m0}) \Psi_{mn}^1(r, \pm\mu_k),$$

$$[\mathbf{b}_{mn}^{\text{a2}\pm}(r)]_k = \pm \frac{1}{\mu_k} (2 - \delta_{m0}) \Psi_{mn}^2(r, \pm\mu_k)$$

для $k = 1, \dots, N_{\text{do}}$.

Если атмосфера неоднородна по высоте, она разбивается на N уровней: $r_1 > r_2 > \dots > r_N$, где $r_1 = r_{\text{toa}}$ и $r_N = r_s$. Слой j ограничен сверху уровнем r_j и снизу уровнем r_{j+1} ; число слоев $N - 1$. Также предполагается, что коэффициенты экстинкции и рассеяния, а также индикатриса рассеяния постоянны внутри слоя. Для слоя j с геометрической толщиной $\Delta r_j = r_j - r_{j+1}$ введем матрицу $\bar{\mathbf{A}}_{mj}$ как усредненную по координате r матрицу слоя $\mathbf{A}_m(r)$. Для каждого слоя получаем интегральную форму уравнения слоя

$$\mathbf{i}_{mj+1} = e^{-\bar{\mathbf{A}}_{mj} \Delta r_j} \mathbf{i}_{mj} - \int_0^{\Delta r_j} e^{-\bar{\mathbf{A}}_{mj} \rho} \mathbf{b}_m(\rho) d\rho, \quad (2.113)$$

которое решается методом матричной экспоненты. Отметим, что при расчете интеграла в правой части уравнения (2.113) от вектора \mathbf{b}_m используя приближение средней секущей (*the average secant approximation*) для нерассеянного и анизотропного слагаемых [54]. После при-

менения масштабного преобразования [250] получаем численно устойчивое уравнение, не содержащее экспонент с положительными показателями вида

$$\mathfrak{A}_{mj}^1 \mathbf{i}_{mj} + \mathfrak{A}_{mj}^2 \mathbf{i}_{mj+1} = \mathbf{b}_{mj}, \quad (2.114)$$

где $\mathfrak{A}_{mj}^1 = \Lambda_{mj}^0 \mathbf{V}_{mj}^{-1}$ и $\mathfrak{A}_{mj}^2 = -\mathbf{D}_{mj} \mathbf{V}_{mj}^{-1}$ – матрицы слоя, $\mathbf{D}_{mj} = \text{diag}[1; \exp(-\lambda_k \Delta r_j)]$ и $\Lambda_{mj}^0 = \text{diag}[\exp(-\lambda_k \Delta r_j); 1]$ – диагональные масштабирующие матрицы и

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_{mj} = & \Lambda_{mj}^1 \mathbf{V}_{mj}^{-1} (\Delta r_j \bar{\mathbf{b}}_{mj}^{\text{sun}}) \mathcal{T}_{\mathbf{s}}(r_j) + \sum_{n=m}^{N_{\text{rank}}^{\text{a}}} [\Lambda_{mj}^2 \mathbf{V}_{mj}^{-1} (\Delta r_j \bar{\mathbf{b}}_{mnj}^{\text{a1}}) \mathcal{T}_{\mathbf{p}}(r_j) \\ & - \Lambda_{mnj}^2 \mathbf{V}_{mj}^{-1} (\Delta r_j \bar{\mathbf{b}}_{mnj}^{\text{a2}}) \mathcal{T}_{\mathbf{n}}(r_j)] \end{aligned} \quad (2.115)$$

– вектор слоя. Диагональные матрицы Λ_{mj}^1 , Λ_{mj}^2 и Λ_{mnj}^2 рассчитываются как

$$\begin{aligned} \Lambda_{mj}^1 &= \text{diag}[b(\lambda_k \Delta r_j, \tau_j^{\text{s}}); c(\lambda_k \Delta r_j, \tau_j^{\text{s}})], \\ \Lambda_{mj}^2 &= \text{diag}[b(\lambda_k \Delta r_j, \tau_j^{\text{p}}); c(\lambda_k \Delta r_j, \tau_j^{\text{p}})], \\ \Lambda_{mnj}^2 &= \text{diag}[b(\lambda_k \Delta r_j, (1 - \omega_j \chi_{nj}) \tau_j^{\text{p}}); c(\lambda_k \Delta r_j, (1 - \omega_j \chi_{nj}) \tau_j^{\text{p}})], \end{aligned}$$

где $b(x, \tau) = \frac{e^{-x} - e^{-\tau}}{\tau - x}$, $c(x, \tau) = \frac{1 - e^{-(\tau+x)}}{\tau + x}$, $\tau_j^{\text{s}} = \mathcal{T}_{\mathbf{s}}(r_{j+1}) - \mathcal{T}_{\mathbf{s}}(r_j)$ и $\tau_j^{\text{p}} = \bar{\sigma}_{\text{ext}j} \Delta r_j / \mu_0$ – оптические толщины для слоя j в сферической и плоскопараллельной геометриях, соответственно, $\omega_j = \bar{\sigma}_{\text{scat}j} / \bar{\sigma}_{\text{ext}j}$ – альбедо однократного рассеяния слоя j и χ_{nj} – коэффициенты разложения индикатрисы рассеяния χ_n слоя j , причем $c(x, \tau) = e^{-x} b(-x, \tau)$ и $b(x, \tau) = e^{-x} c(-x, \tau)$.

Граничные условия на верхней и нижней границах имеют также матричное представление:

$$[\mathbf{0}, \mathbf{I}] \mathbf{i}_{m1} = \mathbf{0}, \quad (2.116)$$

$$[\mathbf{I}, \mathbf{R}_{\text{bottom}}] \mathbf{i}_{mN} = \mathbf{r}_m, \quad (2.117)$$

где \mathbf{I} – единичная матрица, матрицы \mathbf{r}_m и $\mathbf{R}_{\text{bottom}}$ описывают отражательные свойства поверхности. Выражения для них определяются законом отражения поверхности и приведены в работе [60].

Собирая уравнения слоя и граничные условия в систему для всей атмосферы, мы получаем матричное уравнение

Строка\столбец	\mathfrak{A}_m						\mathfrak{b}_m
	$2N_{\text{до}}$	$2N_{\text{до}}$	$2N_{\text{до}}$...	$2N_{\text{до}}$	$2N_{\text{до}}$	
$N_{\text{до}}$	$[\mathbf{0}, \mathbf{I}]$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$...	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$
$2N_{\text{до}}$	$\mathfrak{A}_{m,1}^1$	$\mathfrak{A}_{m,1}^2$	$\mathbf{0}$...	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathfrak{b}_{m,1}$
$2N_{\text{до}}$	$\mathbf{0}$	$\mathfrak{A}_{m,2}^1$	$\mathfrak{A}_{m,2}^2$...	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathfrak{b}_{m,2}$
...
$2N_{\text{до}}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$...	$\mathfrak{A}_{m,N-1}^1$	$\mathfrak{A}_{m,N-1}^2$	$\mathfrak{b}_{m,N-1}$
$N_{\text{до}}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$	$\mathbf{0}$...	$\mathbf{0}$	$[\mathbf{I}, \mathbf{R}_m]$	\mathbf{r}_m

Рисунок 2.4 — Структура глобальной матрицы и вектора-столбца для всей атмосферы.

$$\mathfrak{A}_m \mathbf{i}_m = \mathfrak{b}_m, \quad (2.118)$$

причем размерность \mathfrak{A}_m равна $2N_{\text{до}}N \times 2N_{\text{до}}N$. Матрица \mathfrak{A}_m имеет $3N_{\text{до}} - 1$ поддиагонали и $3N_{\text{до}} - 1$ наддиагонали. Для компактного представления матрицы и быстрого обращения её удобно хранить в формате разреженных матриц или «*band-storage*» формате. Далее применяется стандартный метод инверсии, например, *LU*-разложение. Такой подход будем называть методом с глобальной матрицей. Структура глобальной матрицы показана на рисунке 2.4.

Альтернативный метод расчета яркости на верхней границе атмосферы это матрично-операторный метод. Матрицы отражения и пропускания для слоя j могут быть получены путем перегруппировки элементов матриц в уравнении (2.114) (см. вывод в параграфе 2.1.4).

$$\begin{bmatrix} \mathbf{i}_{mj}^+ \\ \mathbf{i}_{mj+1}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{mj}^+ & \mathbf{T}_{mj}^+ \\ \mathbf{T}_{mj}^- & \mathbf{R}_{mj}^- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{i}_{mj}^- \\ \mathbf{i}_{mj+1}^+ \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Sigma_{mj}^+ \\ \Sigma_{mj}^- \end{bmatrix}. \quad (2.119)$$

Решение краевой задачи организуется рекурсивно. Сначала два верхних слоя объединяются в один слой с эффективными параметрами среды. Следуя работе [242], такой слой называется «стеком». Далее, объединяя стек с нижеследующими слоями, мы получаем матричное уравнение вида (2.119) для всей среды. Яркости, стоящие в правой части уравнения, известны из граничных условий, что позволяет рассчитать яркости в левой части уравнения. Обозначив за \bar{X}_{j-1} параметр X стека из $j - 1$ слоев и за X_j параметр X слоя j , из принципа инвариантности можно получить следующие выражения для сложения слоев матриц отражения и пропускания:

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{R}}_j^- &= \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^- + \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} \mathbf{R}_j^- \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+, \\
\bar{\mathbf{R}}_j^+ &= \mathbf{R}_j^+ + \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \mathbf{T}_j^-, \\
\bar{\mathbf{T}}_j^- &= \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} \mathbf{T}_j^-, \\
\bar{\mathbf{T}}_j^+ &= \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+,
\end{aligned} \tag{2.120}$$

и функции источников

$$\begin{aligned}
\bar{\Sigma}_j^- &= \bar{\Sigma}_{j-1}^- + \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} \left(\mathbf{R}_j^- \bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \Sigma_j^- \right), \\
\bar{\Sigma}_j^+ &= \Sigma_j^+ + \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} \left(\bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \Sigma_j^- \right),
\end{aligned} \tag{2.121}$$

где $\Pi_- = \mathbf{I} - \mathbf{R}_j^- \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+$, $\Pi_+ = \mathbf{I} - \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \mathbf{R}_j^-$.

Преимуществом матрично-операторного метода является малая размерность матриц отражения и пропускания $2N_{\text{до}} \times 2N_{\text{до}}$. К недостаткам метода можно отнести необходимость хранить матрицы для каждого слоя, если используется техника интегрирования источника для расчета яркости в направлении, не совпадающем с направлением ординаты. В качестве альтернативы можно использовать интерполяцию кубическим сплайном или метод ложной ординаты, описанный в разделе 2.3.3.

2.2.5 Анализ точности малоугловой модификации в псевдо-сферической модели

На основе изложенной теории был создан код SAM (от «*small-angle modification*»), в котором реализован метод дискретных ординат с малоугловой модификацией для псевдо-сферической атмосферы. Код имеет две реализации, соответствующие формулировкам (2.105) и (2.112). Он был интегрирован в программу, разработанную в DLR, для интерпретации спутниковых измерений рассеянного излучения в ультрафиолетовом, видимом и инфракрасном диапазоне. Программа включает в себя скалярную и векторные модели, основанные на методе дискретных ординат с матричной экспонентой [60, 243]. Для тестирования программа также содержит плоскопараллельную версию кода DISORT [58] и псевдо-сферическую версию кода libRadtran [251].

В работах [77, 246, 249] были выполнены сравнения методов для однослойной модели. Аналитическое выделение анизотропной части решения приводит к более гладкой регуляр-

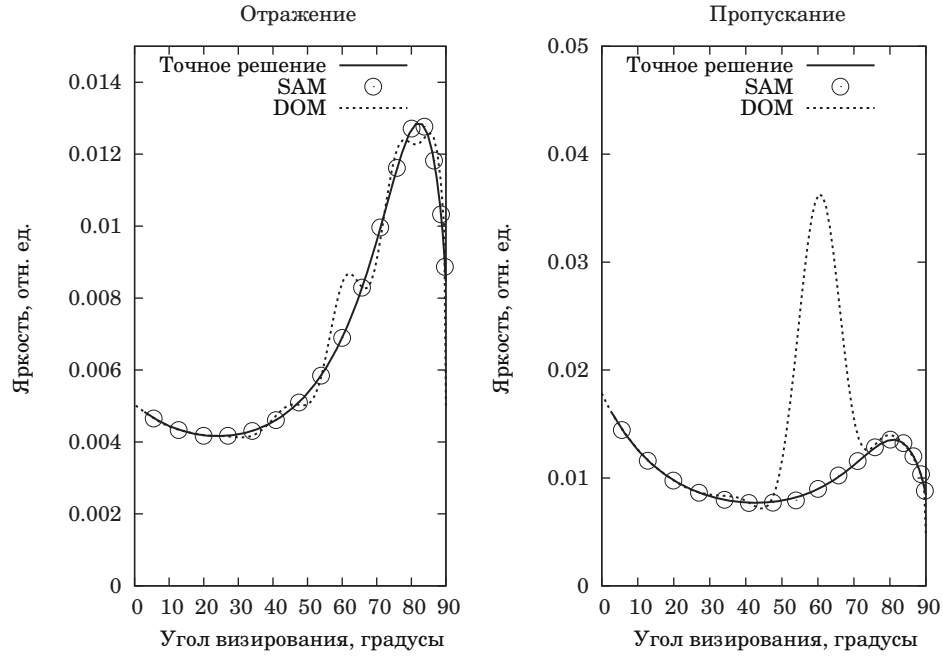


Рисунок 2.5 — Отраженное и прошедшее излучение в случае однослойной модели. Угол падения $\theta_0 = 60^\circ$, количество азимутальных гармоник $M_{\text{rank}} = 16$, количество дискретных ординат $N_{\text{do}} = 16$, оптическая толщина слоя $\tau = 1$, параметр асимметрии индикатрисы $g = 0.9$, альбедо однократного рассеяния $\omega = 0.99$.

ной части, для расчета которой требуется меньшее количество дискретных ординат и азимутальных гармоник по сравнению с традиционным подходом. Так как анизотропная часть решения содержит гладкую часть спектра, спектр регулярной части решения быстро убывает. Это приводит к тому, что при малом числе N_{do} и M_{rank} решение SAM не содержит осцилляций, свойственных традиционному подходу (DOM). На рисунке 2.5 показаны угловые распределения яркости, рассчитанные для одного слоя при M_{rank} и N_{do} , недостаточных для сходимости. Осцилляции в решении SAM меньше, чем в решении DOM. Кроме того, SAM значительно точнее описывает решение в пике прошедшего излучения, так как эта область определяется малоугловой частью решения, которая рассчитывается аналитически.

Проанализируем влияние малоугловой модификации на сходимость для реальных сценариев, использующихся при восстановлении профиля озона. Расчеты выполнены в спектральном интервале 315–335 нм. Модель атмосферы включает молекулярное релеевское рассеяние, аэрозоль из базы OPAC [39] (модель «continental clean») и поглощение молекулами O_3 , NO_2 , и H_2O . Профили газов взяты из [252]. Спектр содержит 40 спектральных точек. Модель атмосферы состоит из 40 слоев: с шагом 1 км между 0 и 25 км, с шагом 2.5 км между 25 и 50 км и с шагом 10 км между 50 и 100 км. Яркость на верхней границе атмосферы рассчитывается для случая измерения в надир. Альбедо поверхности равно 0.1.

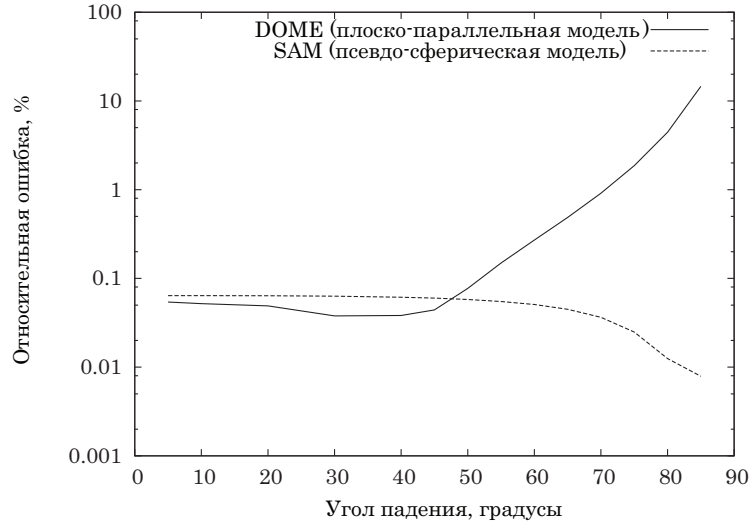


Рисунок 2.6 — Относительная ошибка яркости, рассчитанной с помощью псевдосферической версии SAM и плоско-параллельной версии DOME.

Оценим точность алгоритма SAM для случая псевдосферической атмосферы. Относительная ошибка для формулировки (2.112) алгоритма SAM и плоскопараллельной версии DOME приведена на рисунке 2.6. Относительная ошибка рассчитана для разных углов падения и усреднена по спектральному интервалу. Решения, полученные с помощью псевдосферической версии DOME и LibRadtran, совпадают до 6 знаков. Ошибка рассчитана относительно решения DOME в сферической модели. Относительная ошибка решения алгоритма SAM меньше 0.1 %. Расхождение между псевдосферической и плоско-параллельной версиями DOME порядка $\sim 10\%$ для углов падения 80 градусов, $\sim 1\%$ для 65 градусов и менее 0.3 % для 50 градусов.

На верхней границе атмосферы для верхней полусферы $I_r(r_{\text{тоА}}, \mu > 0, \varphi) = I_d(r_{\text{тоА}}, \mu > 0, \varphi)$. Поэтому на первый взгляд для восходящего потока малоугловая модификация не дает преимуществ по сравнению с традиционным подходом. Однако на практике I_r и I_d вычисляются с помощью численных методов, точность которых определяется количеством дискретных ординат $N_{\text{до}}$, порядком разложения индикатрисы N_{rank} и числом азимутальных гармоник M_{rank} . Когда оба алгоритма сходятся, то равенство $I_r(r_{\text{тоА}}, \mu > 0, \varphi) = I_d(r_{\text{тоА}}, \mu > 0, \varphi)$ справедливо. Однако скорость сходимости алгоритмов различна. Следовательно, скорость сходимости может рассматриваться как мера эффективности метода. Для текущего анализа сходимость организована следующим образом: для заданного числа дискретных ординат $N_{\text{до}}$ порядок разложения индикатрисы рассчитывается как $N_{\text{rank}} = 2N_{\text{до}} - 1$, а число азимутальных гармоник M_{rank} определяется с помощью критерия сходимости Коши по коэффициентам разложения функции яркости в ряд Фурье

$$\frac{|I_{M_{\text{rank}}}^r|}{\sum_{q=0}^{M_{\text{rank}}-1} |I_q^r|} < \varepsilon_{\text{az}} \quad (2.122)$$

(аналогично для I_d). При расчете анизотропной части яркости используется максимально доступное число N_{rank}^a коэффициентов разложения индикатрисы рассеяния в слое с облаком. Таким образом, сходимость организована по дискретным ординатам N_{do} . Следует заметить, что большое значение N_{rank}^a необходимо для корректного вычитания углового распределения анизотропной части.

Далее сравним сходимость алгоритма SAM в формулировке (2.112) и алгоритма DOME с delta-M методом. Так как delta-M метод нарушает исходную краевую задачу, точным будем считать решение, полученное с помощью DOME без delta-M приближения при достаточно большом числе дискретных ординат. Порог сходимости $\varepsilon_{\text{az}} = 10^{-5}$. Рассмотрим следующую модель: атмосфера содержит облако оптической толщины $\tau = 2$, координата верхней границы $h_{\text{top}} = 10$ км, геометрическая толщина $\Delta h = 1$ км. Используется индикатриса Хенби-Гринштейна с параметром асимметрии $g = 0.95$. Угол падения $\theta_0 = 70^\circ$. Расчет выполнен для $\lambda = 315$ нм. На рисунках 2.7 и 2.8 показаны функции яркости на верхней границе атмосферы, рассчитанные с помощью радиационных кодов SAM и DOME при $N_{\text{do}} = 12$ и $N_{\text{do}} = 16$, соответственно. За точное принято решение при $N_{\text{do}} = 128$. Для углов наблюдения $0^\circ < \theta < 60^\circ$ решения SAM ближе к точному, чем решения DOME. На рисунке 2.9 показаны относительные ошибки решений SAM и DOME, усредненные по углам наблюдения для разных значений N_{do} . Представленные графики демонстрируют более быструю сходимость SAM по сравнению с DOME.

В следующем примере используется модель кучевого облака с модифицированным гамма-распределением частиц по размерам из базы данных OPAC [39]

$$p(a) \propto a^\alpha \exp \left[-\frac{\alpha}{\gamma} \left(\frac{a}{a_{\text{mod}}} \right)^\gamma \right].$$

Диапазон размеров частиц от $0.02 \mu\text{m}$ до $50.0 \mu\text{m}$. Верхняя граница облака расположена на высоте $h_{\text{top}} = 5$ км, геометрическая толщина $\Delta h = 1$ км, оптическая толщина $\tau = 10$. Оптические характеристики облака вычислены с помощью расчета по теории Ми с аналитическим усреднением по размерам частиц, как описано в [253]. Параметры распределения по размерам: $a_{\text{mod}} = 3.53 \mu\text{m}$, $\alpha = 8$, $\gamma = 2.15$ для модели облака «continental polluted», и $a_{\text{mod}} = 4.8 \mu\text{m}$, $\alpha = 5$, $\gamma = 2.16$ для модели облака «continental clean». Индикатриса рассеяния имеет $N_{\text{rank}}^{\text{max}} = 341$ членов разложения для «continental polluted» облака, и $N_{\text{rank}}^{\text{max}} = 545$

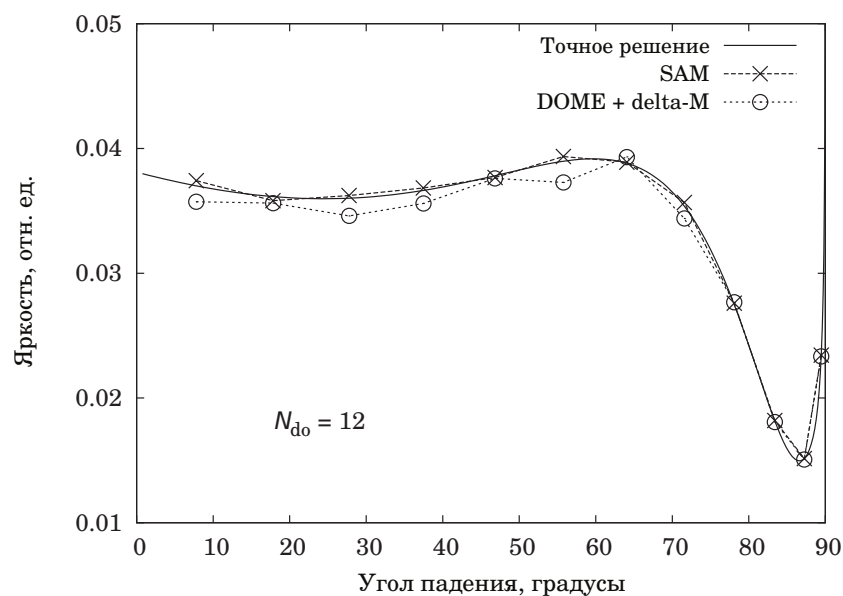


Рисунок 2.7 — Яркость на верхней границе атмосферы в направлении дискретных ординат. Расчет произведен с помощью кодов SAM и DOME при $N_{do} = 12$.

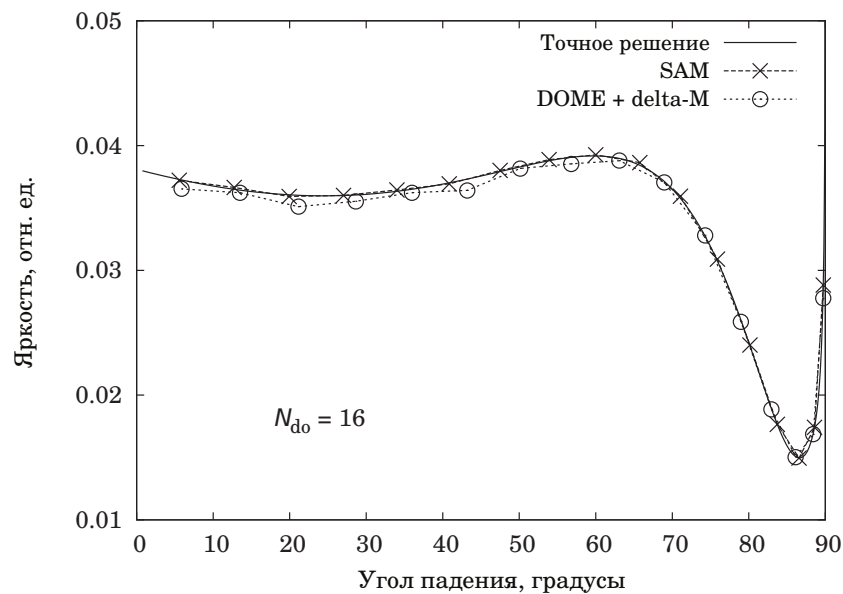


Рисунок 2.8 — Яркость на верхней границе атмосферы в направлении дискретных ординат. Расчет произведен с помощью кодов SAM и DOME $N_{do} = 16$.

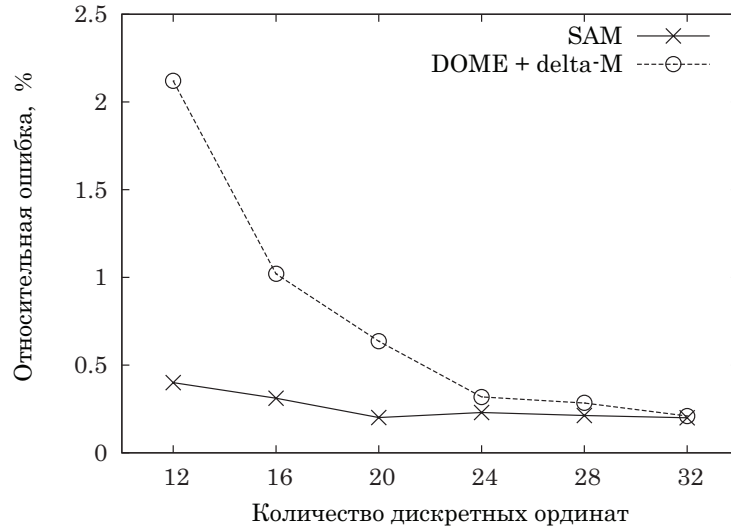


Рисунок 2.9 — Относительная ошибка решений SAM и DOME, усредненная по углам наблюдения.

«continental clean» облака. Угол падения $\theta_0 = 70^\circ$, угол визирования $\theta = 45^\circ$. Для расчета условно точного решения использовались $N_{\text{до}} = 156$ и $N_{\text{до}} = 256$ дискретных ординат для «continental polluted» и «continental clean» облаков, соответственно. Относительные ошибки кодов SAM и DOME, усредненные по спектру, показаны на рисунках 2.10 и 2.11 для разных значений $N_{\text{до}}$. Скорость сходимости у алгоритма SAM больше скорости сходимости DOME, хотя преимущество не такое существенное, как в предыдущем примере (см. рисунок 2.9). Причина в том, что чем ниже расположено облако, тем больше оптическая толщина релеевской атмосферы над облаком, и угловое распределение яркости на верхней границе атмосферы становится более изотропным.

Сравнение формулировок SAM для псевдосферической атмосферы (2.105) и (2.112) приведено на рисунке 2.12. Для этого примера в модель включено облако со следующими параметрами: $\tau = 20$, $h_{\text{top}} = 5$ км, $\Delta h = 1$ км, $g = 0.95$. Угол падения $\theta_0 = 70^\circ$. Угол визирования $\theta = 45^\circ$. Графики показывают, что формулировка (2.112) точнее формулировки (2.105), особенно для малых значений $N_{\text{до}}$. Объяснение заключается в том, что в функции источников из анизотропного слагаемого не полностью вычтен вклад нерассеянного излучения.

2.3 Оптимизация метода дискретных ординат

Как уже отмечалось, метод дискретных ординат является ядром алгоритма решения уравнения переноса. Для быстрой обработки спутниковых измерений алгоритмы должны быть распараллелены, а радиационные коды максимально адаптированы к поставленной за-

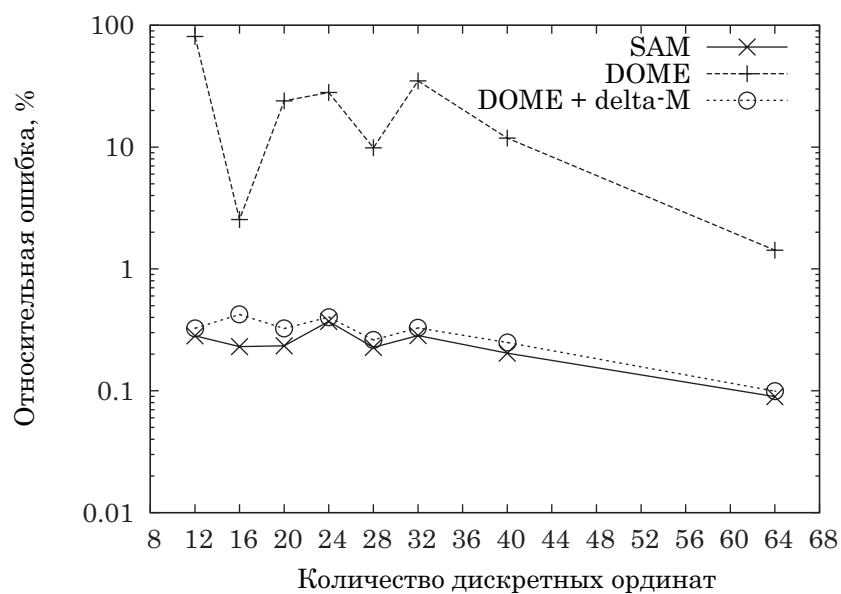


Рисунок 2.10 — Относительная ошибка кодов SAM и DOME для модели с облаком «continental polluted».

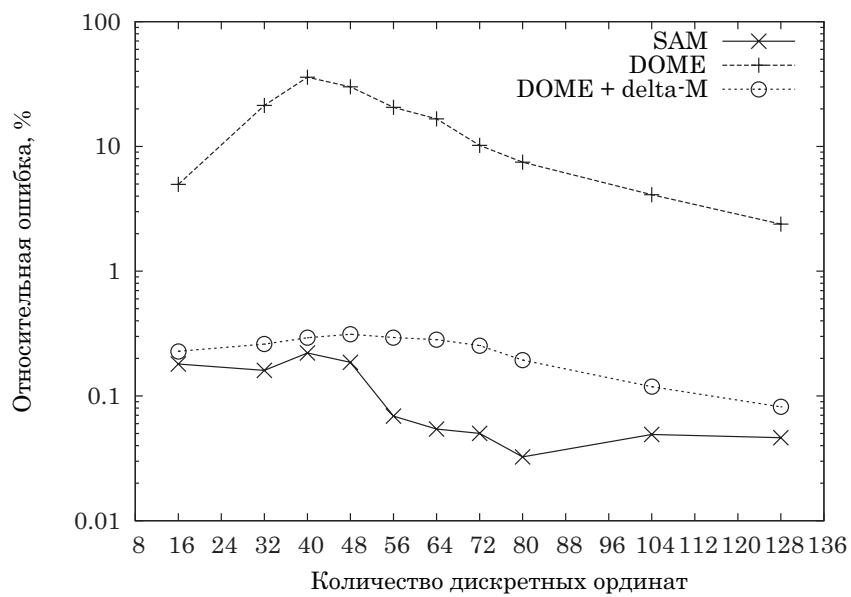


Рисунок 2.11 — Относительная ошибка кодов SAM и DOME для модели с облаком «continental clean».

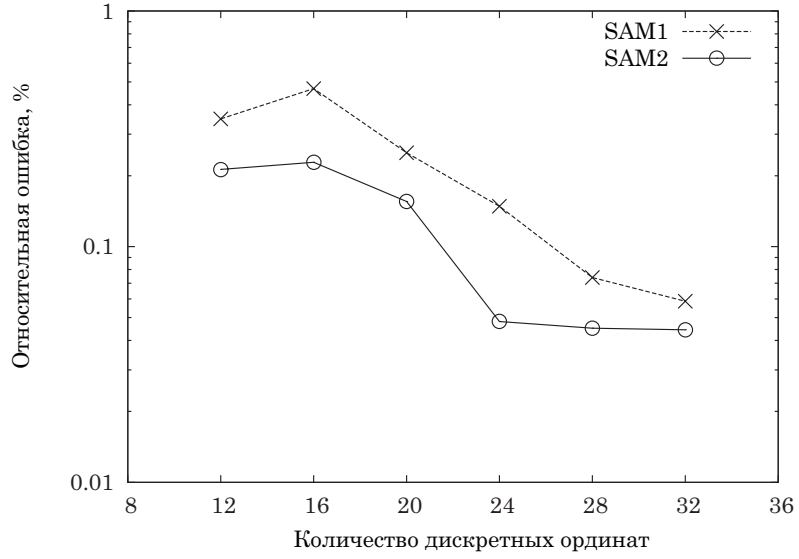


Рисунок 2.12 — Относительная ошибка кода SAM: формулировка (2.105) (SAM1) и формулировка (2.112) (SAM2).

даче. Рассмотрим метод левых собственных векторов, телескопический метод и метод ложной ординаты для ускорения решения прямой задачи.

2.3.1 Метод левых собственных векторов

Рассмотрим, как можно избежать обращения матрицы при спектральном разложении матрицы слоя (2.27). Идея вычисления обратной матрицы правых собственных векторов с помощью левых собственных векторов принадлежит Вотерману (Waterman). В работе [234] функция яркости сначала масштабировалась для того, чтобы получить матрицу слоя с симметричными элементами. Затем уравнение решалось через матричную экспоненту. Обращение матрицы собственных векторов производилось с учетом специальной структуры матрицы слоя. После этого производилось обратное масштабирование для получения решения исходного уравнения. Аналогичное масштабирование матрицы слоя использовалось в работах Nakajima&Tanaka [235], и Stamnes&Swanson [236]. В отличие от этих работ, ниже схожее преобразование осуществляется непосредственно над матрицей слоя, что позволяет получить искомую обратную матрицу.

Рассмотрим однородное уравнение слоя (в этой части используются обозначения из работы [58]):

$$\begin{bmatrix} \frac{du^+}{d\tau} \\ \frac{du^-}{d\tau} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u^+ \\ u^- \end{bmatrix},$$

где

$$\begin{aligned}\alpha &= M^{-1}(C^+W - I), \quad M = \mu_i \delta_{ij}, \quad C^\pm = \frac{\omega}{2} p(\mu_i, \pm \mu_j), \\ \beta &= M^{-1}C^-W, \quad W = w_i \delta_{ij}.\end{aligned}$$

В этих обозначениях матрица слоя имеет вид:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -\alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{bmatrix}.$$

В работе [58], принимая во внимание структуру матрицы \mathbf{A} , уменьшается размерность задачи на собственные значения в два раза. Рассмотрим задачу на собственные значения:

$$\begin{bmatrix} -\alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} = \lambda_k \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix}.$$

Матричное уравнение эквивалентно системе двух уравнений:

$$\begin{cases} -\alpha \mathbf{v}_k^+ - \beta \mathbf{v}_k^- = \lambda_k \mathbf{v}_k^+, \\ \beta \mathbf{v}_k^+ + \alpha \mathbf{v}_k^- = \lambda_k \mathbf{v}_k^-. \end{cases}$$

Складывая и вычитая эти уравнения и группируя слагаемые, мы приходим к следующей системе:

$$\begin{cases} (\beta - \alpha) (\mathbf{v}_k^+ - \mathbf{v}_k^-) = \lambda_k (\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-), \\ -(\beta + \alpha) (\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-) = \lambda_k (\mathbf{v}_k^+ - \mathbf{v}_k^-). \end{cases} \quad (2.123)$$

Умножая первое уравнение слева на $(\beta + \alpha)$, мы получаем:

$$(\beta + \alpha) (\beta - \alpha) (\mathbf{v}_k^+ - \mathbf{v}_k^-) = \lambda_k (\beta + \alpha) (\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-).$$

Нетрудно видеть, что правая часть уравнения может быть выражена через второе уравнение системы (2.123). Таким образом, мы имеем новую задачу на собственные значения:

$$(\beta + \alpha) (\beta - \alpha) (\mathbf{v}_k^+ - \mathbf{v}_k^-) = \lambda_k^2 (\mathbf{v}_k^+ - \mathbf{v}_k^-).$$

Аналогично,

$$(\alpha - \beta) (\beta + \alpha) (\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-) = \lambda_k^2 (\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-). \quad (2.124)$$

Если, скажем, мы решаем задачу на собственные значения для $(\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-)$, то, используя второе уравнение из (2.123), мы можем найти и $(\mathbf{v}_k^+ - \mathbf{v}_k^-)$:

$$(\mathbf{v}_k^+ - \mathbf{v}_k^-) = \frac{-(\beta + \alpha)(\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-)}{\lambda_k}.$$

Главная идея метода левых собственных векторов заключается в выражении матричных элементов обратной матрицы правых собственных векторов через матричные элементы транспонированной матрицы левых собственных векторов. Прежде докажем, что для любой матрицы \mathbf{M} , имеющей полный набор линейно независимых собственных векторов, обратная матрица правых собственных векторов равна транспонированной матрице левых собственных векторов. Действительно, пусть \mathbf{M} – матрица $n \times n$ с различными собственными значениями, \mathbf{x}_k – правый собственный вектор матрицы \mathbf{M} , соответствующий собственному значению λ_k , то есть, $\mathbf{M}\mathbf{x}_k = \lambda_k\mathbf{x}_k$, и \mathbf{y}_l – это левый собственный вектор матрицы \mathbf{M} , соответствующий собственному значению λ_l , то есть, $\mathbf{M}^T\mathbf{y}_l = \lambda_l\mathbf{y}_l$. Тогда из $\mathbf{y}_l^T\mathbf{M}\mathbf{x}_k = \lambda_k\mathbf{y}_l^T\mathbf{x}_k = \lambda_l\mathbf{y}_l^T\mathbf{x}_k$ видно, что $\mathbf{y}_l^T\mathbf{x}_k = 0$ при $\lambda_k \neq \lambda_l$. Далее, полагая, что векторы \mathbf{x}_k и \mathbf{y}_k нормированы в смысле $\mathbf{y}_k^T\mathbf{x}_k = 1$, $k = 1, \dots, n$, мы находим, что $\mathbf{X}^{-1} = \mathbf{Y}^T$, где $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n]^T$, $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n]$.

Q.E.D.

Из-за структуры матрицы \mathbf{A} , собственные значения появляются в парах $(\pm\lambda_k)$, а матрица собственных векторов имеет вид:

$$\mathbf{X} = \left[\begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} ; \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^- \\ \mathbf{v}_k^+ \end{bmatrix} \right].$$

Определим квадратный корень из диагональной матрицы $\mathbf{T} = \{t_i\delta_{ij}\}$ как $\sqrt{\mathbf{T}} = \{\sqrt{t_i}\delta_{ij}\}$ и используем масштабное преобразование из [234]:

$$\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{T}, \quad (2.125)$$

где

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \sqrt{\mathbf{M}^{-1}\mathbf{W}^{-1}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\mathbf{M}^{-1}\mathbf{W}^{-1}} \end{bmatrix}.$$

После преобразования соответствующие матричные элементы масштабированной матрицы слоя $\hat{\mathbf{A}}$ имеют вид:

$$\hat{\alpha} = \sqrt{MW}\alpha\sqrt{M^{-1}W^{-1}} = \sqrt{WM^{-1}}C^+\sqrt{M^{-1}W} - M^{-1},$$

$$\hat{\beta} = \sqrt{MW}\beta\sqrt{M^{-1}W^{-1}} = \sqrt{WM^{-1}}C^-\sqrt{M^{-1}W}.$$

Матрицы $\hat{\alpha}$ и $\hat{\beta}$ симметричны, в отличие от α и β . Следовательно, матричные элементы матрицы $\hat{\mathbf{A}}^T$ выражаются через матричные элементы матрицы $\hat{\mathbf{A}}$:

$$\hat{\mathbf{A}}^T = \begin{bmatrix} -\hat{\alpha} & \hat{\beta} \\ -\hat{\beta} & \hat{\alpha} \end{bmatrix}.$$

Далее мы формулируем задачу на собственные значения для масштабированной матрицы с учетом того, что преобразование (2.125) не меняет собственные значения λ_k :

$$\hat{\mathbf{A}} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} = \lambda_k \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix}, \quad (2.126)$$

где \mathbf{v}_k^\pm – собственные вектора матрицы $\hat{\mathbf{A}}$. Подставляя (2.125) в (2.126), можно получить:

$$\mathbf{TAT}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} = \lambda_k \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix}. \quad (2.127)$$

Следовательно,

$$\mathbf{A} \left(\mathbf{T}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} \right) = \lambda \left(\mathbf{T}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} \right). \quad (2.128)$$

Очевидно, выражение в круглых скобках является собственным вектором матрицы \mathbf{A} .

Для $k \neq l$ справедливо:

$$\text{а) } \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} \perp \begin{bmatrix} \mathbf{v}_l^+ \\ -\mathbf{v}_l^- \end{bmatrix}; \text{ б) } \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^- \\ \mathbf{v}_k^+ \end{bmatrix} \perp \begin{bmatrix} -\mathbf{v}_l^- \\ \mathbf{v}_l^+ \end{bmatrix}.$$

Докажем утверждение а). Для этого рассмотрим задачу на собственные значения для $\hat{\mathbf{A}}$:

$$\hat{\mathbf{A}} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\hat{\alpha} & -\hat{\beta} \\ \hat{\beta} & \hat{\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\hat{\alpha}\mathbf{v}_k^+ - \hat{\beta}\mathbf{v}_k^- \\ \hat{\beta}\mathbf{v}_k^+ + \hat{\alpha}\mathbf{v}_k^- \end{bmatrix} = \lambda_k \begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ \\ \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix}.$$

Далее, мы делаем упрощения:

$$\hat{\mathbf{A}}^T \begin{bmatrix} \mathbf{v}_l^+ \\ -\mathbf{v}_l^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\hat{\alpha} & \hat{\beta} \\ -\hat{\beta} & \hat{\alpha} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_l^+ \\ -\mathbf{v}_l^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\hat{\alpha}\mathbf{v}_l^+ - \hat{\beta}\mathbf{v}_l^- \\ -\hat{\beta}\mathbf{v}_l^+ - \hat{\alpha}\mathbf{v}_l^- \end{bmatrix} = \lambda_l \begin{bmatrix} \mathbf{v}_l^+ \\ -\mathbf{v}_l^- \end{bmatrix}.$$

Последние два выражения показывают, что $\begin{bmatrix} \mathbf{v}_k^+ & \mathbf{v}_k^- \end{bmatrix}^T$ и $\begin{bmatrix} \mathbf{v}_l^+ & -\mathbf{v}_l^- \end{bmatrix}^T$ – правые и левые собственные векторы, соответственно, что и доказывает утверждение а). Утверждение б) доказывается аналогично.

Q.E.D.

Таким образом,

$$\hat{\mathbf{X}} = \left[\frac{\text{sign}(a_k)}{\sqrt{|a_k|}} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^+ \\ \hat{\mathbf{v}}_k^- \end{bmatrix}; \frac{\text{sign}(a_k)}{\sqrt{|a_k|}} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^- \\ \hat{\mathbf{v}}_k^+ \end{bmatrix} \right],$$

$$\hat{\mathbf{X}}^{-1} = \left[\frac{1}{\sqrt{|a_k|}} \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{v}}_k^+ \\ -\hat{\mathbf{v}}_k^- \end{bmatrix}; \frac{1}{\sqrt{|a_k|}} \begin{bmatrix} -\hat{\mathbf{v}}_k^- \\ \hat{\mathbf{v}}_k^+ \end{bmatrix} \right].$$

Нормировочный коэффициент $a_k = \|\hat{\mathbf{v}}_k^+\|^2 - \|\hat{\mathbf{v}}_k^-\|^2$ необходим для выполнения условия нормировки $\mathbf{y}_k^T \mathbf{x}_k = 1$. Далее, необходимо выполнить обратное масштабное преобразование: $\mathbf{X} = \mathbf{T}\hat{\mathbf{X}}$, $\mathbf{X}^{-1} = \hat{\mathbf{X}}^{-1}\mathbf{T}$. Отметим, что прямое и обратное масштабные преобразования выполняются с помощью умножения на диагональные матрицы, а поэтому выполняются быстро.

2.3.2 Телескопический метод

Для точного описания индикатрисы рассеяния для облака или аэрозоля требуется $N_{\text{rank}} \sim 100 \div 1000$ членов разложения в зависимости от степени вытянутости индикатрисы. При этом, релеевская индикатриса рассеяния имеет только три коэффициента разложения. В работе [88] был предложен телескопический метод. Суть его заключается в том, что для слоев только с молекулярным рассеянием уравнение слоя, а также система уравнений для всей атмосферы в целом могут быть упрощены для гармоник высокого порядка. Эта идея была использована при разработке кодов DOME и SAM.

Телескопический метод основан на том, что для слоя j , в котором есть молекулярное рассеяние, но отсутствуют аэрозоли и облака, коэффициенты разложения индикатрисы $p_{mj} = 0$ для $m > 2$. Следовательно, матрица слоя \mathbf{A} имеет диагональный вид, а вектор слоя $\mathbf{b} = 0$ для $m > 2$. Спектральное разложение для диагональной матрицы \mathbf{A} тривиально: собственные

значения равны диагональным элементам матрицы \mathbf{A} , а матрица собственных векторов равна единичной матрице.

Телескопический метод для метода дискретных ординат с глобальной матрицей для всей атмосферы описан в работе [60]. Применим аналогичный подход для матрично-операторного метода. Идея заключается в решении граничной задачи для слоя с облаком и последующем рекурсивном нахождении яркости на остальных уровнях.

При $m > 2$ для релеевского слоя j , справедливо: $\mathbf{R}_j^\pm = 0$ и $\mathbf{T}_j^+ = \mathbf{T}_j^- = \text{diag} \left[\exp \left(-\frac{1}{\mu_k} \sigma_{\text{ext}j} \Delta r_j \right) \right]$, где $\Delta r_j = r_j - r_{j+1}$, и $\Sigma_j^\pm = 0$. Тогда формулы сложения слоев (2.120) и (2.121) могут быть упрощены. Итоговые выражения для атмосферы из N релеевских слоев и одного слоя \bar{j} с облаком имеют вид:

$$\bar{\mathbf{R}}_N^- = \mathbf{T}_{\text{up}} \mathbf{R}_{\bar{j}}^- \mathbf{T}_{\text{up}}, \quad \bar{\mathbf{R}}_N^+ = \mathbf{T}_{\text{down}} \mathbf{R}_{\bar{j}}^+ \mathbf{T}_{\text{down}},$$

$$\bar{\mathbf{T}}_N^- = \mathbf{T}_{\text{up}} \mathbf{T}_{\bar{j}}^- \mathbf{T}_{\text{down}}, \quad \bar{\mathbf{T}}_N^+ = \mathbf{T}_{\text{down}} \mathbf{T}_{\bar{j}}^+ \mathbf{T}_{\text{up}},$$

$$\bar{\Sigma}_{\bar{j}+1}^- = \mathbf{T}_{\text{up}} \Sigma_{\bar{j}}^-, \quad \bar{\Sigma}_{\bar{j}+1}^+ = \mathbf{T}_{\text{down}} \Sigma_{\bar{j}}^+,$$

где

$$\mathbf{T}_{\text{up}} = \text{diag} \left[\exp \left(-\frac{1}{\mu_k} \sum_{j=1}^{\bar{j}-1} \sigma_{\text{ext}j} \Delta r_j \right) \right]$$

– матрица пропускания для слоев над облаком и

$$\mathbf{T}_{\text{down}} = \text{diag} \left[\exp \left(-\frac{1}{\mu_k} \sum_{j=\bar{j}+1}^N \sigma_{\text{ext}j} \Delta r_j \right) \right]$$

– матрица пропускания для слоев под облаком.

2.3.3 Метод ложной ординаты

Метод дискретных ординат позволяет найти решение в узлах μ_k гауссовой квадратурной схемы. Для расчета функции яркости в заданном направлении визирования μ_{LOS} (*line of sight*) можно использовать интерполяцию между узлами квадратуры. Альтернативный подход называется методом интегрирования источника. Исходное уравнение переноса записывается в виде

$$\mu \frac{dI}{dr}(r, \Omega) = -\sigma_{\text{ext}}(r) I(r, \Omega) + J(r, \Omega). \quad (2.129)$$

Функция источников $J(r, \Omega)$ имеет два слагаемых

$$J(r, \Omega) = J_{\text{ss}}(r, \Omega) + J_{\text{ms}}(r, \Omega), \quad (2.130)$$

где $J_{\text{ss}}(r, \Omega)$ описывает вклад однократного рассеяния и имеет вид

$$J_{\text{ss}}(r, \Omega) = \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} F_{\text{sun}} e^{-\tau_{\text{ext}}^{\text{sun}}(r)} P(r, \Omega, \Omega_0), \quad (2.131)$$

а $J_{\text{ms}}(r, \Omega)$ описывает вклад многократного рассеяния и равен

$$J_{\text{ms}}(r, \Omega) = \frac{\sigma_{\text{sct}}(r)}{4\pi} \int_{4\pi} P(r, \Omega, \Omega') I(r, \Omega') d\Omega'. \quad (2.132)$$

Решение в направлении μ_{LOS} на верхней границе атмосферы записывается в интегральной форме

$$\begin{aligned} I(r, \Omega_{\text{LOS}}) &= I(r_s, \Omega_{\text{LOS}}) e^{-\frac{1}{\mu_{\text{LOS}}} \tau(r)} \\ &+ \frac{1}{\mu_{\text{LOS}}} \int_{r_s}^r J(r', \Omega_{\text{LOS}}) e^{-\frac{1}{\mu_{\text{LOS}}} [\tau(r) - \tau(r')]} dr'. \end{aligned} \quad (2.133)$$

Очевидно, что $I(r, \Omega_{\text{LOS}})$ является решением уравнения (2.129) для $\Omega = \Omega_{\text{LOS}}$. При расчете $J_{\text{ms}}(r, \Omega)$ интеграл в (2.132) заменяется гауссовой квадратурой с узлами μ_k , $k = 1, \dots, N_{\text{do}}$, для которых уже известно решение. Этот метод реализован в кодах DISORT, LIDORT и DOME.

Альтернативой методу интегрирования источника является метод ложной ординаты. В гауссову квадратуру добавляется ордината μ_{LOS} с нулевым весовым коэффициентом $w_{\text{LOS}} = 0$. Метод ложной ординаты обсуждался в ряде статей в контексте матрично-операторного метода [87, 254]. Как показано в работе [255], оба метода являются эквивалентными и превосходят по точности интерполяцию между узлами квадратуры.

Добавление ложных ординат приводит к «расширенной» матрице слоя, которая имеет вид

$$\mathbf{A}_a = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{A}_{12} & -\mathbf{A}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{\text{LOS}}^+ & \mathbf{A}_{\text{LOS}}^- & \Sigma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{\text{LOS}} & \Sigma \end{bmatrix}, \quad (2.134)$$

где

$$[\mathbf{A}_{\text{LOS}}^{\pm}]_{kl} = \frac{1}{2\mu_{\text{LOS}}^k} \sigma_{\text{sct}j} p_{mj} (\mu_{\text{LOS}}^k, \pm\mu_l) w_l,$$

для $k = 1, \dots, N_{\text{LOS}}$, $l = 1, \dots, N_{\text{do}}$ и $\Sigma = \text{diag}[\sigma_1, \dots, \sigma_{N_{\text{LOS}}}]$, где

$$\sigma_k = -\frac{1}{\mu_{\text{LOS}}^k} \sigma_{\text{ext}j},$$

для $k = 1, \dots, N_{\text{LOS}}$. Матрица \mathbf{A}_{LOS} имеет размерность $N_{\text{LOS}} \times 2N_{\text{do}}$ и определена как $\mathbf{A}_{\text{LOS}} = [\mathbf{A}_{\text{LOS}}^+, \mathbf{A}_{\text{LOS}}^-]$. Как следствие, увеличивается размерность задачи на собственные значения, что может замедлить расчет. Для того, чтобы этого избежать, получим выражения для расчета левых и правых собственных векторов для N_{LOS} ложных ординат $\mu_{\text{LOS}}^k > 0$, $k = 1, \dots, N_{\text{LOS}}$.

Рассмотрим факторизацию «расширенной» матрицы

$$\mathbf{A}_a = \mathbf{X}_a \Lambda_a \mathbf{Y}_a^T, \quad (2.135)$$

где

$$\mathbf{X}_a = \begin{bmatrix} \mathbf{T}\hat{\mathbf{X}} & \mathbf{0} \\ \hat{\mathbf{X}}_{\text{LOS}} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \quad \Lambda_a = \begin{bmatrix} \Lambda & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Sigma \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Y}_a^T = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{Y}}^T \mathbf{T}^{-1} & \mathbf{0} \\ \hat{\mathbf{Y}}_{\text{LOS}} & \mathbf{I} \end{bmatrix}. \quad (2.136)$$

Таким образом, собственные значения, соответствующие ложным ординатам, равны σ_k . Необходимо найти матрицы $\hat{\mathbf{X}}_{\text{LOS}}$ и $\hat{\mathbf{Y}}_{\text{LOS}}$ размерностью $N_{\text{LOS}} \times 2N_{\text{do}}$. Из $\mathbf{X}_a \mathbf{Y}_a^T = \mathbf{I}$ следует, что

$$\hat{\mathbf{Y}}_{\text{LOS}} = -\hat{\mathbf{X}}_{\text{LOS}} \hat{\mathbf{Y}}^T \mathbf{T}^{-1}. \quad (2.137)$$

Из (2.135) и (2.136) мы получаем

$$\mathbf{A}_a = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \hat{\mathbf{X}}_{\text{LOS}} \Lambda \hat{\mathbf{Y}}^T \mathbf{T}^{-1} + \Sigma \hat{\mathbf{Y}}_{\text{LOS}} & \Sigma \end{bmatrix}. \quad (2.138)$$

Подстановка (2.138) в (2.134) приводит к выражению

$$\hat{\mathbf{X}}_{\text{LOS}} \Lambda \hat{\mathbf{Y}}^T \mathbf{T}^{-1} + \Sigma \hat{\mathbf{Y}}_{\text{LOS}} = \mathbf{A}_{\text{LOS}}. \quad (2.139)$$

Обозначим k -ые столбцы матриц $\hat{\mathbf{X}}_{\text{LOS}}^T$ и $\mathbf{A}_{\text{LOS}}^T$ за $\hat{\mathbf{x}}_{\text{LOS}}^k$ и $\mathbf{a}_{\text{LOS}}^k$, соответственно. Тогда из (2.137) следует, что

$$\hat{\mathbf{x}}_{\text{LOS}}^k = (\Lambda - \sigma_k \mathbf{I})^{-1} \hat{\mathbf{X}}^T \mathbf{T} \mathbf{a}_{\text{LOS}}^k, \quad k = 1, \dots, N_{\text{LOS}}. \quad (2.140)$$

Очевидно, вектор $\hat{\mathbf{x}}_{\text{LOS}}^k$ определен при $\lambda_l \neq |\sigma_k|$ для $l = 1, \dots, N_{\text{do}}$ и $k = 1, \dots, N_{\text{LOS}}$.

Таким образом, для набора ложных дискретных ординат факторизация матрицы \mathbf{A}_a включает в себя задачу на собственные значения для матрицы \mathbf{A} размерностью $N_{\text{do}} \times N_{\text{do}}$ и вычисление матриц $\hat{\mathbf{X}}_{\text{LOS}}$ и $\hat{\mathbf{Y}}_{\text{LOS}}$ с помощью (2.140) и (2.137), соответственно. Альтернативным подходом является введение сопряженных ложных ординат μ_{LOS}^k и $-\mu_{\text{LOS}}^k$ и решение задачи на собственные значения для матрицы размерности $(N_{\text{do}} + N_{\text{LOS}}) \times (N_{\text{do}} + N_{\text{LOS}})$. При использовании метода левых собственных векторов возникает проблема с расчетом $\mathbf{W}^{-1/2}$, так как $w_{\text{LOS}}^k = 0$. Поэтому на практике параметру w_{LOS}^k присваивается малое значение ε , например, $\varepsilon = 10^{-7}$, так что $w_l \gg \varepsilon$ для $l = 1, \dots, N_{\text{do}}$. Подход с сопряженными ложными ординатами увеличивает размерность задачи на собственные значения и, таким образом, уменьшает скорость решения прямой задачи. Однако в приложениях, где требуется небольшое число ложных ординат (например, для обработки данных GOME-2 интеграл по полю зрения инструмента рассчитывается по 2-3 точкам [46]) этот метод достаточно эффективен и прост в реализации.

2.4 Линеаризация метода дискретных ординат с малоугловой модификацией

2.4.1 Постановка задачи

В этой части мы рассмотрим линеаризацию метода дискретных ординат с малоугловой модификацией. Целью линеаризации является вычисление частных производных по искомому параметру. Далее частные производные собираются в матрицу Якоби, необходимую для решения обратной задачи, согласно итерационной схеме (1.17). Теория линеаризованных уравнений переноса была развита R.J.D. Spurr и нашла практическую реализацию в пакете LIDORT. Мы остановимся на основных принципах линеаризации, а также выделим особенности, обусловленные малоугловой модификацией метода.

Методология линеаризации сводится к аналитическому дифференцированию всех стадий решения. Реализация метода дискретных ординат сводится к набору матричных операций (сложение, умножение, инверсия). Для их линеаризации можно воспользоваться известными правилами дифференцирования:

$$\frac{\partial (\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2)}{\partial \xi_i} = \frac{\partial \mathbf{M}_1}{\partial \xi_i} + \frac{\partial \mathbf{M}_2}{\partial \xi_i},$$

$$\frac{\partial (\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2)}{\partial \xi_i} = \frac{\partial \mathbf{M}_1}{\partial \xi_i} \mathbf{M}_2 + \mathbf{M}_1 \frac{\partial \mathbf{M}_2}{\partial \xi_i},$$

$$\frac{\partial (\mathbf{M})^{-1}}{\partial \xi_i} = -\mathbf{M}^{-1} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \xi_i} \mathbf{M}^{-1},$$

где \mathbf{M}_1 , \mathbf{M}_2 , \mathbf{M} – некоторые матрицы, используемые в решении, ξ_i – параметр слоя i , по которому линеаризуется алгоритм. Последовательная линеаризация приводит к дифференцированию уравнения слоя j (2.114). Для удобства приведем его вновь:

$$\mathfrak{A}_{mj}^1 \mathbf{i}_{mj} + \mathfrak{A}_{mj}^2 \mathbf{i}_{mj+1} = \mathbf{b}_{mj}.$$

Продифференцируем уравнение слоя по ξ_i :

$$\mathfrak{A}_{m,j}^1 \frac{\partial \mathbf{i}_{m,j}}{\partial \xi_i} + \mathfrak{A}_{m,j}^2 \frac{\partial \mathbf{i}_{m,j+1}}{\partial \xi_i} = \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}}{\partial \xi_i} - \frac{\partial \mathfrak{A}_{m,j}^1}{\partial \xi_i} \mathbf{i}_{m,j} - \frac{\partial \mathfrak{A}_{m,j}^2}{\partial \xi_i} \mathbf{i}_{m,j+1}. \quad (2.141)$$

Параметр ξ , по которому осуществляется дифференцирование, зависит от решаемой обратной задачи. При определении профиля озона следует учитывать, что концентрация конкретного газа, для которого определяется распределение, не влияет на рассеивающие свойства атмосферы, а определяет только коэффициент поглощения σ_a . Коэффициент рассеяния является функцией давления и температуры, которые считаются заданными (или определяются ранее из инфракрасной области спектра). Индикатрисы рассеяния также зависят от термодинамических параметров атмосферы, а также от аэрозолей и облаков. Поэтому при восстановлении распределения газов уравнение переноса линеаризуется по σ_{ext} . Для задач, связанных с определением параметров, влияющих на процесс рассеяния, необходимо линеаризовать модель также по σ_{scat} . Наконец, если речь идет об определении микрофизических свойств атмосферы, то необходим расчет производных по коэффициентам разложения индикатрис рассеяния.

2.4.2 Линеаризация общего решения

Отметим, что матрицы $\mathfrak{A}_{m,j}^1$ и $\mathfrak{A}_{m,j}^2$ зависят только от параметров слоя j . Поэтому

$$\frac{\partial \mathfrak{A}_{m,j}^1}{\partial \xi_i} = \frac{\partial \mathfrak{A}_{m,j}^2}{\partial \xi_i} = 0, \quad i \neq j. \quad (2.142)$$

Правило цепного дифференцирования приводит нас к вычислению производных от собственных векторов $\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \xi}$ и собственных значений $\frac{\partial \lambda}{\partial \xi}$ (для сокращения записи индексы опущены).

После процедуры уменьшения размера матрицы слоя [58], описанной в части 2.3.1, задача на собственные значения имеет вид:

$$\mathbf{M} (\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-) = \lambda_k^2 (\mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-), \quad (2.143)$$

где $\mathbf{M} = (\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12})(\mathbf{A}_{11} + \mathbf{A}_{12})$, $\mathbf{v}_k = \mathbf{v}_k^+ + \mathbf{v}_k^-$. Применим дифференциальный оператор $\partial/\partial\xi$ к (2.143):

$$\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \xi} \mathbf{v}_k + \mathbf{M} \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial \xi} = 2\lambda_k \frac{\partial \lambda_k}{\partial \xi} \mathbf{v}_k + \lambda_k^2 \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial \xi}. \quad (2.144)$$

Добавляя к уравнению (2.144) условие ортогональности для собственных векторов, получаем матричное уравнение:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{v}_k & \lambda_k^2 I - \mathbf{M} \\ 0 & \mathbf{v}_k^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2\lambda_k \frac{\partial \lambda_k}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial \xi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \xi} \mathbf{v}_k \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.145)$$

решая которое, мы находим искомые производные от собственных векторов и значений.

2.4.3 Линеаризация частного решения

2.4.3.1 Линеаризация по коэффициенту рассеяния

Метод выделения анизотропной части решения определяет вид вектора слоя в уравнении (2.114). Приведем выкладки для случая малоугловой модификации. Рассмотрим линеаризацию по коэффициенту рассеяния $\frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}}$. Для удобства представим вектор слоя (см. уравнение (2.115)) в виде суммы двух слагаемых:

$$\mathbf{b}_{m,j} = \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}} + \mathbf{b}_{m,j}^{\text{SA}}, \quad (2.146)$$

где $\mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}$ – вклад в функцию источников от прямого солнечного излучения, $\mathbf{b}_{m,j}^{\text{SA}}$ – вклад в функцию источников от анизотропной части решения. Выражения для них следуют из уравнения (2.115):

$$\mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}} = \Lambda_{mj}^1 \mathbf{V}_{mj}^{-1} (\Delta r_j \bar{\mathbf{b}}_{mj}^{\text{sun}}) \mathcal{T}_{\text{s}}(r_j), \quad (2.147)$$

$$\mathbf{b}_{m,j}^{\text{SA}} = \sum_{n=m}^{N_{\text{rank}}^{\text{a}}} \left[\Lambda_{m,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} (\Delta r_j \bar{\mathbf{b}}_{mn,j}^{\text{a1}}) \mathcal{T}_{\text{p}}(r_j) - \Lambda_{mn,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} (\Delta r_j \bar{\mathbf{b}}_{mn,j}^{\text{a2}}) \mathcal{T}_n(r_j) \right]. \quad (2.148)$$

Продифференцируем слагаемые правой части уравнения (2.146):

$$\frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} = \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} + \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{SA}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}}.$$

Производная от вклада прямого солнечного излучения имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} &= \delta_{ij} \frac{\partial \Lambda_{m,j}^1 \mathbf{V}_{m,j}^{-1}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} (\Delta r_j \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}) \mathcal{T}_j^s, \\ &+ \Lambda_{m,j}^1 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} \Delta r_j \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} \mathcal{T}_j^s + \Lambda_{m,j}^1 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} (\Delta r_j \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}) \frac{\partial \mathcal{T}_j^s}{\partial \sigma_{\text{sct},i}}, \end{aligned}$$

где

$$\frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} = \pm \frac{1}{\mu_k} (2 - \delta_{m0}) \frac{\delta_{ij}}{4\pi} F_{\text{sun}} p_{m,j} (\pm \mu_k, -\mu_0),$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}_j^s}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} = 0,$$

где δ_{ij} – символ Кронекера. Производная от малоугловой части имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{SA}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} &= \sum_{n=m}^{N_{\text{rank}}^{\text{a}}} \left[\delta_{ij} \frac{\partial (\Lambda_{m,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1})}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} (\Delta r_j \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a1}}) \mathcal{T}(r_j) + \Lambda_{m,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} \Delta r_j \frac{\partial \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a1}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} \mathcal{T}(r_j) \right. \\ &+ \Lambda_{m,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} (\Delta r_j \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a1}}) \frac{\partial \mathcal{T}(r_j)}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} - \delta_{ij} \frac{\partial (\Lambda_{mn,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1})}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} (\Delta r_j \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a2}}) \mathcal{T}_n(r_j) \\ &\left. - \Lambda_{mn,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} \Delta r_j \frac{\partial \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a2}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} \mathcal{T}_n(r_j) - \Lambda_{mn,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} (\Delta r_j \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a2}}) \frac{\partial \mathcal{T}_n(r_j)}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} \right], \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a1}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} = \pm \frac{1}{\mu_k} (2 - \delta_{m0}) \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \left\{ -\frac{1}{2} \delta_{ij} \chi_{nj} \right\} P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0),$$

$$\frac{\partial \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a2}}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} = \frac{1}{\mu_k} (2 - \delta_{m0}) \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \left(1 + \frac{\mu_k}{\mu_0} \right) \left[-\frac{1}{2} \delta_{ij} \chi_{nj} \right] P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0),$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}(r_j)}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} = 0,$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}_n(r_j)}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} = (1 - \delta_{ij}) \frac{1}{\mu_0} \Delta r_l \left(\frac{1}{2} \chi_{ni} \right) \mathcal{T}_n(r_j).$$

Отметим, что в классическом подходе, когда выделяется только прямое излучение, справедливо:

$$\frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}}{\partial \sigma_{\text{sct},i}} = 0, \quad i \neq j.$$

2.4.3.2 Линеаризация по коэффициенту экстинкции

Рассмотрим $\frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}}$:

$$\frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} = \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} + \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{SA}}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}}.$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} &= \delta_{ij} \frac{\partial (\Lambda_{m,j}^1 \mathbf{V}_{m,j}^{-1})}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} (\Delta r_j \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}) \mathcal{T}_j^s + \Lambda_{m,j}^1 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} \Delta r_j \frac{\partial (\mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}})}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} \mathcal{T}_j^s \\ &\quad + \Lambda_{m,j}^1 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} (\Delta r_j \mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}}) \frac{\partial \mathcal{T}_j^s}{\partial \sigma_{\text{ext},i}}. \end{aligned}$$

$$\frac{\partial (\mathbf{b}_{m,j}^{\text{sun}})}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} = 0.$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}_j^s}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} = -(1 - \delta_{ij}) \frac{1}{\mu_0} \Delta r_i \exp \left[-\frac{1}{\mu_0} \sum_{l=1}^{j-1} \sigma_{\text{ext},l} \Delta r_l \right].$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{b}_{m,j}^{\text{SA}}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} &= \sum_{n=m}^{N_{\text{rank}}^{\text{a}}} \left[\delta_{ij} \frac{\partial (\Lambda_{m,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1})}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} (\Delta r_j \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a1}}) \mathcal{T}(r_j) + \Lambda_{m,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} \Delta r_j \frac{\partial \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a1}}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} \mathcal{T}(r_j) \right. \\ &\quad \left. \Lambda_{mn,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} (\Delta r_j \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a2}}) \frac{\partial \mathcal{T}(r_j)}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} - \delta_{ij} \frac{\partial (\Lambda_{m,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1})}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} (\Delta r_j \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a2}}) \mathcal{T}_n(r_j) \right. \\ &\quad \left. - \Lambda_{mn,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} \Delta r_j \frac{\partial \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a2}}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} \mathcal{T}_n(r_j) - \Lambda_{mn,j}^2 \mathbf{V}_{m,j}^{-1} (\Delta r_j \mathbf{b}_{mn,j}^{\text{a2}}) \frac{\partial \mathcal{T}_n(r_j)}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} \right]. \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \mathbf{b}_{mn,j}^{\mathbf{a}1}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} = \frac{\partial \mathbf{b}_{mn,j}^{\mathbf{a}2}}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} = \delta_{ij} \frac{1}{\mu_k} (2 - \delta_{m0}) \frac{F_{\text{sun}}}{2\pi} \left\{ \frac{\mu_k}{\mu_0} + 1 \right\} P_n^m(\mu) P_n^m(-\mu_0).$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}(r_j)}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} = -(1 - \delta_{ij}) \frac{1}{\mu_0} \Delta r_i \exp \left[-\frac{1}{\mu_0} \sum_{l=1}^{j-1} \sigma_{\text{ext},l} \Delta r_l \right].$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}_n(r_j)}{\partial \sigma_{\text{ext},i}} = -(1 - \delta_{ij}) \frac{1}{\mu_0} \Delta r_i \mathcal{T}_n(r_j).$$

2.4.4 Линеаризация многослойной модели

Для линеаризации метода с глобальной матрицей продифференцируем уравнение (2.118) по рассматриваемому параметру j -того слоя ξ_j :

$$\mathfrak{A}_m \frac{\partial \mathbf{i}_m}{\partial \xi_j} = \frac{\partial \mathbf{b}_m}{\partial \xi_j} - \frac{\partial \mathfrak{A}_m}{\partial \xi_j} \mathbf{i}_m,$$

откуда следует выражение для производных от функции яркости:

$$\frac{\partial \mathbf{i}_m}{\partial \xi_j} = \mathfrak{A}_m^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{b}_m}{\partial \xi_j} - \frac{\partial \mathfrak{A}_m}{\partial \xi_j} \mathbf{i}_m \right). \quad (2.149)$$

В силу условия (2.142) матрица $\partial \mathfrak{A}_m / \partial \xi_j$ имеет только $2N_{\text{ao}}$ ненулевых строк, соответствующих слою j . Матрица \mathfrak{A}_m^{-1} и вектор \mathbf{i}_m уже были вычислены при решении прямой задачи. Отметим, что в случае расчета для нескольких углов падения необходимо пересчитывать только $\partial \mathbf{b}_m / \partial \xi_j$, а \mathfrak{A}_m не меняется.

Линеаризация матрично-операторного метода основана на концепции стека слоев и осуществляется в два шага. Рассмотрим добавление слоя j к стеку из $j-1$ слоев. На первом шаге для слоя j вычисляются производные от матриц отражения $\partial \mathbf{R}_j^{\pm} / \partial \xi_j$, производные от матриц пропускания $\partial \mathbf{T}_j^{\pm} / \partial \xi_j$, а также производные для функции источников $\{\partial \Sigma_j^+ / \partial \xi_p\}_{p=1, \dots, j}$ (заметим, что функция источников имеет ненулевые производные по параметрам вышележащих слоев). Этот расчет осуществляется на основе правила цепного дифференцирования. На втором шаге линеаризованный слой j добавляется к уже линеаризованному стеку из $j-1$ слоев. Для вывода правил объединения линеаризованных слоев достаточно продифференцировать соотношения (2.120) и (2.121) по ξ_j :

$$\frac{\partial}{\partial \xi_j} \bar{\mathbf{R}}_j^- = \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \left(\frac{\partial}{\partial \xi_j} \Pi_-^{-1} \mathbf{R}_j^- + \Pi_-^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{R}_j^- \right) \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+, \quad (2.150)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \bar{\mathbf{R}}_j^+ &= \frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{R}_j^+ + \frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \mathbf{T}_j^- \\ &\quad + \mathbf{T}_j^+ \frac{\partial}{\partial \xi_j} \Pi_+^{-1} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \mathbf{T}_j^- + \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{T}_j^-, \end{aligned} \quad (2.151)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_j} \bar{\mathbf{T}}_j^- = \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \left(\frac{\partial}{\partial \xi_j} \Pi_-^{-1} \mathbf{T}_j^- + \Pi_-^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{T}_j^- \right), \quad (2.152)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_j} \bar{\mathbf{T}}_j^+ = \left(\frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} + \mathbf{T}_j^+ \frac{\partial}{\partial \xi_j} \Pi_+^{-1} \right) \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+ \quad (2.153)$$

и

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \bar{\Sigma}_j^- &= \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \frac{\partial}{\partial \xi_j} \Pi_-^{-1} \left(\mathbf{R}_j^- \bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \Sigma_j^- \right) \\ &\quad + \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{R}_j^- \bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \frac{\partial}{\partial \xi_j} \Sigma_j^- \right), \end{aligned} \quad (2.154)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi_j} \bar{\Sigma}_j^+ &= \frac{\partial}{\partial \xi_j} \Sigma_j^+ + \frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} \left(\bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \Sigma_j^- \right) \\ &\quad + \mathbf{T}_j^+ \frac{\partial}{\partial \xi_j} \Pi_+^{-1} \left(\bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \Sigma_j^- \right) + \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \frac{\partial}{\partial \xi_j} \Sigma_j^-, \end{aligned} \quad (2.155)$$

где $\frac{\partial}{\partial \xi_j} \Pi_- = -\frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{R}_j^- \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+$, $\frac{\partial}{\partial \xi_j} \Pi_+ = -\bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \frac{\partial}{\partial \xi_j} \mathbf{R}_j^-$.

Также необходимо пересчитать производные от матриц стека по параметрам слоев, расположенных выше слоя j . Для этого применим оператор $\frac{\partial}{\partial \xi_i}$ к (2.120) и (2.121) ($i = 1, \dots, j-1$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{R}}_j^- &= \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^- + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} \mathbf{R}_j^- \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+ \\ &\quad + \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \frac{\partial}{\partial \xi_i} \Pi_-^{-1} \mathbf{R}_j^- \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+ + \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} \mathbf{R}_j^- \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+, \end{aligned} \quad (2.156)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{R}}_j^+ = \mathbf{T}_j^+ \left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \Pi_+^{-1} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ + \Pi_+^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \right) \mathbf{T}_j^-, \quad (2.157)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{T}}_j^- = \left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} + \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \frac{\partial}{\partial \xi_i} \Pi_-^{-1} \right) \mathbf{T}_j^-, \quad (2.158)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{T}}_j^+ = \mathbf{T}_j^+ \left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \Pi_+^{-1} \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+ + \Pi_+^{-1} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^+ \right), \quad (2.159)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\Sigma}_j^- &= \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\Sigma}_{j-1}^- + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} \left(\mathbf{R}_j^- \bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \Sigma_j^- \right) \\
&+ \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \frac{\partial}{\partial \xi_i} \Pi_-^{-1} \left(\mathbf{R}_j^- \bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \Sigma_j^- \right) \\
&+ \bar{\mathbf{T}}_{j-1}^- \Pi_-^{-1} \left(\mathbf{R}_j^- \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \Sigma_j^- \right), \tag{2.160}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\Sigma}_j^+ &= \frac{\partial}{\partial \xi_i} \Sigma_j^+ + \mathbf{T}_j^+ \frac{\partial}{\partial \xi_i} \Pi_+^{-1} \left(\bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \Sigma_j^- \right) \\
&+ \mathbf{T}_j^+ \Pi_+^{-1} \left(\frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\Sigma}_{j-1}^+ + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \Sigma_j^- + \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \frac{\partial}{\partial \xi_i} \Sigma_j^- \right), \tag{2.161}
\end{aligned}$$

где $\frac{\partial}{\partial \xi_i} \Pi_- = -\mathbf{R}_j^- \frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+$, $\frac{\partial}{\partial \xi_i} \Pi_+ = -\frac{\partial}{\partial \xi_i} \bar{\mathbf{R}}_{j-1}^+ \mathbf{R}_j^-$.

Таким образом, малоугловая модификация метода дискретных ординат полностью линеаризована аналитически без введения дополнительных предположений. Корректность полученных соотношений была проверена методом конечных разностей.

2.5 Анализ аналитических способов ускорения метода дискретных ординат

В этой части мы проанализируем описанные выше методы ускорения дискретных ординат. Анализ проведем на примере кодов DOME и SAM. Приведем основные особенности их реализации. 1. Концептуально код SAM является альтернативой (заменой) коду DOME с delta-M методом. 2. Код SAM использует матрично-операторный метод и метод ложной ординаты. 3. Код DOME использует подход с глобальной матрицей и рассчитывает яркость в направлении визирования с помощью метода ложной ординаты или с помощью метода интегрирования источника. Также в нем реализован матрично-операторный метод с ложной ординатой. 4. Код DOME использует delta-M метод и TMS метод. 5. В обоих кодах реализован метод левых собственных векторов.

Исчерпывающий анализ точности малоугловой модификации в сравнении с TMS-методом приведен в работе [77]. Авторы проанализировали различные сценарии, включающие слои, содержащие аэрозоли и облака, с различными оптическими толщинами. Было показано, что в зависимости от параметров модели, TMS-метод может быть как хуже, так и лучше SAM в контексте точности решения. Так как TMS-метод предполагает этап последующей обработки (*post-processing*), т.е. вычисления поправки с учетом всех коэффициентов разложения индикатрисы, при анализе скорости алгоритмов мы ограничимся сравнением

SAM и DOME с delta-M методом. С учетом этих ограничений, мы рассмотрим следующие тесты:

1. сравнение кодов SAM и DOME по точности;
2. сравнение метода интегрирования источника с методом ложной ординаты для кода DOME с глобальной матрицей;
3. сравнение метода глобальной матрицы с матрично-операторным методом на примере DOME с ложной ординатой;
4. анализ метода левых собственных векторов для кодов SAM и DOME с ложной ординатой;
5. анализ телескопического метода на примере кодов SAM и DOME с ложной ординатой.

За основу взята модель, описанная в части 2.2.5. Расчеты выполнены в спектральном интервале 315–335 нм с шагом 0.11 нм. Модель включает газы O_3 и NO_2 , а также слой с облаком с оптической толщиной $\tau = 20$, верхней границей облака $h_{top} = 5$ км, геометрической толщиной $\Delta h = 1$ км, и индикатрисой Хеньи-Гринштейна с параметром асимметрии $g = 0.95$. Угол падения $\theta_0 = 45^\circ$, угол визирования $\theta = 45^\circ$.

На рисунке 2.13 показаны относительные ошибки решений SAM и DOME, усредненных по спектральному интервалу, для разных значений N_{do} . Параметры, определяющие сходимость, были выбраны следующим образом: для заданного N_{do} мы используем $N_{rank} = 2N_{do} - 1$ членов разложения индикатрисы, а M_{rank} определяется внутри алгоритма с помощью критерия сходимости Коши (2.122) по азимутальным гармоникам с $\varepsilon_{az} = 10^{-5}$. За точное решение принято решение DOME без delta-M метода при $N_{do} = 128$. Расчеты показывают, что точность 0.1% достигается при меньшем N_{do} для SAM, чем для DOME.

На рисунках 2.14 и 2.15 показаны время счета и относительное ускорение кода DOME в контексте метода глобальной матрицы с методом интегрирования источника и с методом ложной ординаты при $N_{los} = 1$. Скорости счета для двух случаев отличаются меньше, чем на 5% для $N_{do} > 24$. Относительное ускорение метода с временем счета t_1 относительно метода с временем счета $t_2 > t_1$ определяется как $s = (t_2 - t_1) / t_1 \times 100\%$. На рисунке 2.14 также показана зависимость времени счета DOME с матрично-операторным методом и методом ложной ординаты как функция от числа ординат. Хотя размерность матриц в матрично-операторном методе мала (размер матриц равен $2N_{do} \times 2N_{do}$ и не зависит от числа слоев), его скорость счета меньше скорости альтернативного метода с глобальной матрицей из-за

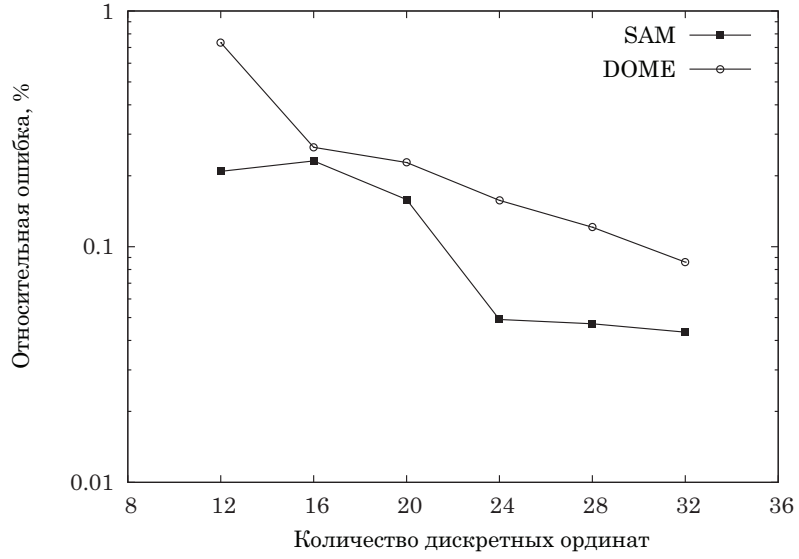


Рисунок 2.13 — Относительные ошибки решений SAM и DOME.

большого числа обращений и перемножений матриц при объединении слоев (см. (2.120) и (2.121)). Тем не менее, разница в быстродействии двух подходов не велика.

В последнем в этой части примере яркость рассчитана методом ложной ординаты. Для удобства $N_{\text{LOS}} = 1$. Чтобы проанализировать влияние метода левых собственных векторов на скорость счета, количество азимутальных гармоник зафиксировано $M_{\text{rank}} = 3$, и меняется только число дискретных ординат N_{do} . Время счета и относительное ускорение показаны на рисунках 2.16 и 2.17, соответственно. Относительное ускорение в среднем около 15 %. С помощью утилиты анализа производительности `grof` установлено, что для модели из 40 слоев 40%-60% времени счета затрачивается на решение задачи на собственные значения при спектральной декомпозиции матрицы слоя, зависимость времени решения которой имеет зависимость $\sim N_{\text{do}}^3$ [237]. Поэтому время счета на рисунке 2.16 имеет кубическую зависимость от числа ординат.

Чтобы проанализировать влияние телескопического метода на время счета, зафиксируем количество дискретных ординат $N_{\text{do}} = 32$ и измерим время счета для разного числа азимутальных гармоник M_{rank} . Результаты показаны на рисунках 2.18 и 2.19. Очевидно, для $M_{\text{rank}} \leq 2$, телескопическая техника не приводит к ускорению, так как рассеяние происходит во всех слоях. При $M_{\text{rank}} \geq 3$ для всех слоев с релеевским рассеянием решение упрощается. Время счета практически не увеличивается с M_{rank} . При $M_{\text{rank}} = 16$, относительное ускорение равно $\approx 100\%$. Так как обычно критерий сходимости для рассматриваемой модели выполняется при $M_{\text{rank}} = 4 \div 8$, можно считать, что телескопический метод приводит к ускорению в среднем на 30 %. Отметим, что, когда телескопический метод не используется, расчеты для

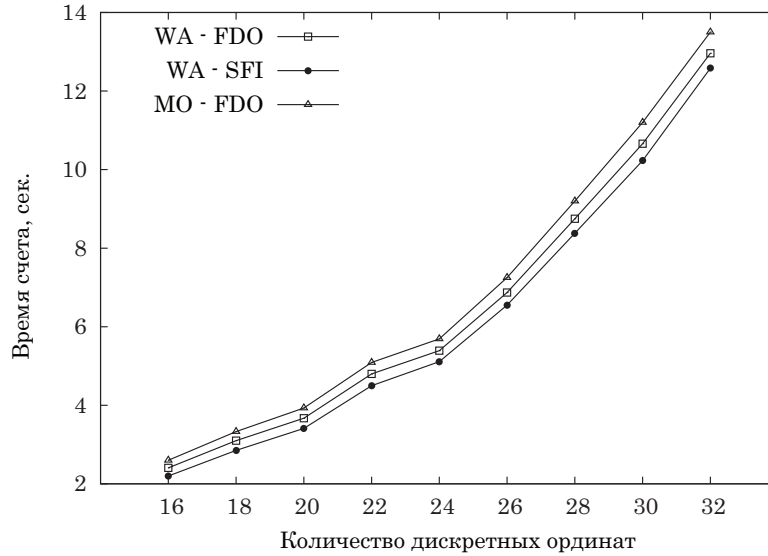


Рисунок 2.14 — Время счета кода DOME с методом глобальной матрицы, с матрично-операторным методом, методом интегрирования источника и методом ложной ординаты.

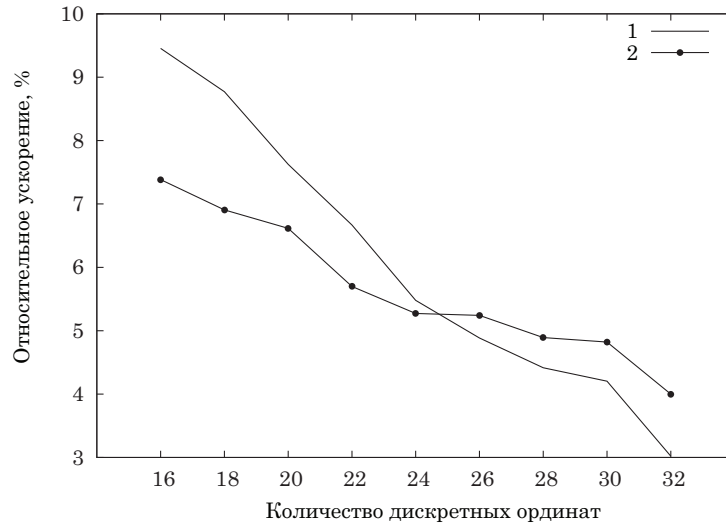


Рисунок 2.15 — (1) Разница времени счета с методом интегрирования источника относительно времени счета с методом ложной ординаты для DOME с методом глобальной матрицы; (2) Разница времени счета с глобальной матрицей относительно времени счета с матрично-операторным методом для DOME с методом ложной ординаты.

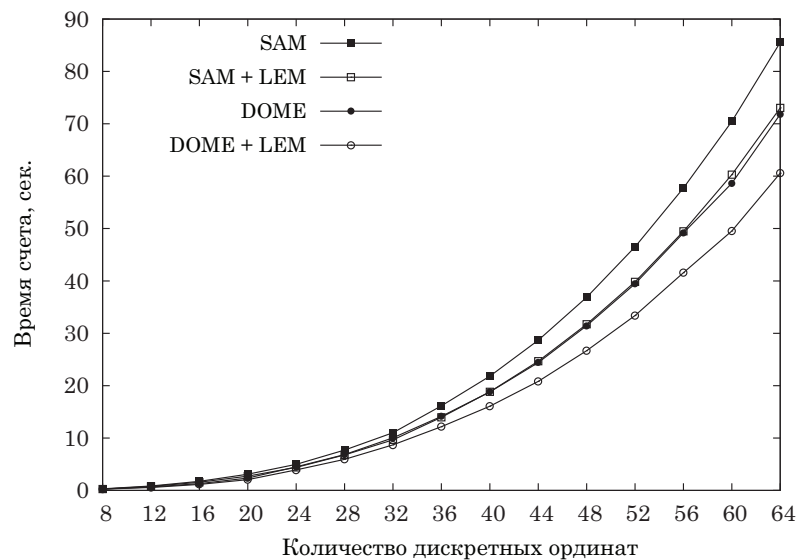


Рисунок 2.16 — Время счета кодов DOME и SAM – метод левых собственных векторов.

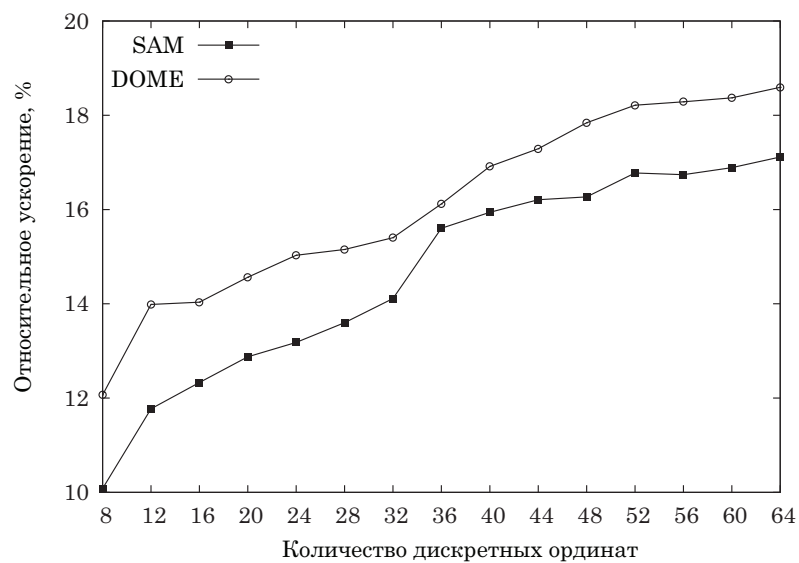


Рисунок 2.17 — Относительное ускорение кодов DOME и SAM методом левых собственных векторов.

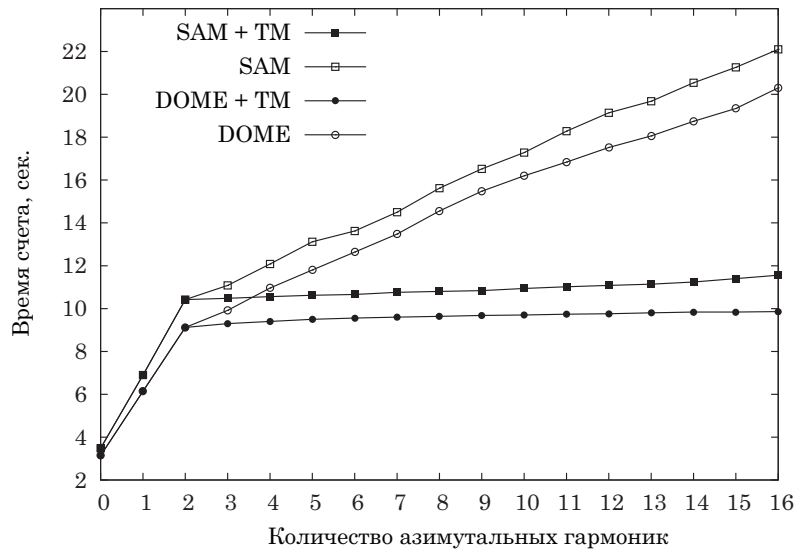


Рисунок 2.18 — Время счета кодов DOME и SAM – влияние телескопического метода (TM).

$M_{\text{rank}} \leq 2$ и $M_{\text{rank}} > 2$ идентичны с точки зрения быстродействия. Однако, расчет гармоник для $M_{\text{rank}} > 2$ выполняется быстрее, чем для $M_{\text{rank}} \leq 2$, благодаря оптимизации компилятора и библиотеки LAPACK.

Также, численный анализ показывает, что при одинаковом числе дискретных ординат и азимутальных гармоник, используемых в расчете, время счета для кода SAM больше времени счета кода DOME в среднем на 20 %, так как в SAM используется более сложный расчет функции источников. Однако для SAM заданная точность достигается при меньшем числе M_{rank} и N_{do} .

Для линейризованного кода описанные методы приводят к аналогичным ускорениям, что и для прямых моделей. Исключение составляют методы учета многослойности атмосферы. На рисунке 2.20 показаны время счета линейризации 40-слойной модели для метода глобальной матрицы и для матрично-операторного метода. Линейризация матрично-операторного метода требует выполнения большого числа матричных операций. При добавлении слоя к стеку, стек должен быть заново линейризован по параметрам включенных слоев. Поэтому количество необходимых для линейризации операций увеличивается квадратично с числом слоев. В методе глобальной матрицы эта зависимость линейна. Таким образом, несмотря на то, что рассмотренные методы эквиваленты для прямой модели, как показывает рисунок 2.14, линейризованный метод глобальной матрицы более эффективен в плане скорости расчета, чем линейризованный матрично-операторный метод.

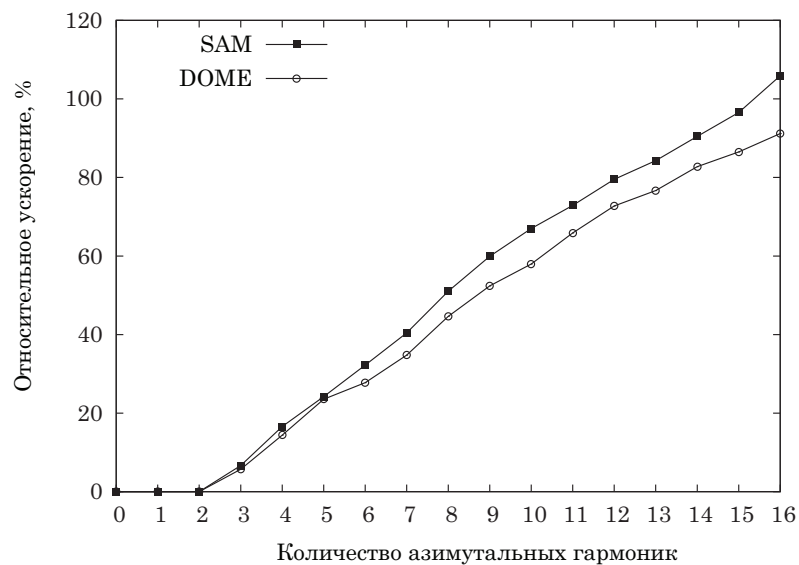


Рисунок 2.19 — Относительное ускорение кодов DOME и SAM благодаря телескопическому методу.

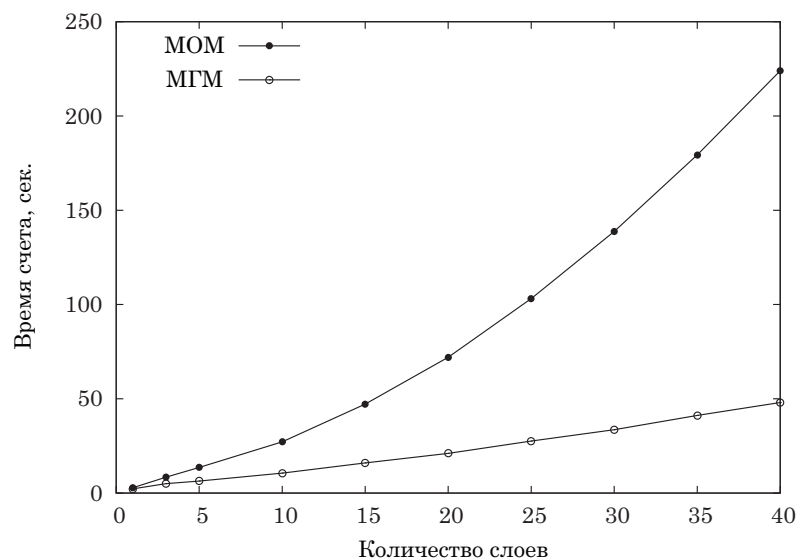


Рисунок 2.20 — Время счета линеаризованной модели с методом глобальной матрицы (МГМ) и матрично-операторным методом (МОМ).

Результаты Главы 2

1. Было проведено обобщение модификации метода дискретных ординат, основанной на аналитическом выделении анизотропной части, рассчитанной в малоугловом приближении, на псевдосферическую модель атмосферы в двух формулировках. Первая формулировка приводит к появлению дополнительного слагаемого в функции источников уравнения переноса, записанного в псевдосферической геометрии. Это слагаемое обусловлено малоугловой частью решения. Вторая формулировка основана на введении псевдосферической поправки в уравнение переноса, в котором уже выделена анизотропная часть. При конечном числе членов разложения анизотропной части вторая формулировка более точная.
2. Для достижения точности решения 1 % при решении монохроматической задачи модифицированный метод дискретных ординат не требует привлечения других методов, связанных с искажением индикатрисы рассеяния, как δ -М метод. Модифицированный метод обладает более быстрой сходимостью по сравнению с традиционным подходом.
3. Малоугловая модификация МСГ была линеаризована аналитически без дополнительных предположений о виде индикатрисы и решения. В отличие от метода конечных разностей, метод не требует многократного вызова прямой модели.
4. Проанализировано несколько методов ускорения дискретных ординат, таких как метод левых собственных векторов, телескопический метод, метод ложной ординаты, на примере расчетных сценариев, использующихся при восстановлении профиля озона. Метод левых собственных векторов приводит к ускорению 15 %, телескопический метод в среднем ускоряет решение на 30 %. Получены аналитические выражения для собственных векторов матрицы слоя в случае нескольких ложных ординат. Метод ложных ординат является альтернативой методу интегрирования источника, эквивалентен ему по точности, однако избавляет от пост-обработки решения и приводит к более простой линеаризованной модели. Достигнуто общее ускорение с учетом малоугловой модификации примерно в два раза при расчете спектра в полосе Хюггинса.
5. Метод глобальной матрицы и матрично-операторный метод практически эквивалентны при расчете яркости. Однако при расчете матрицы Якоби метод глобальной матрицы быстрее, так как не требует пересчета производных по параметрам среды при добавлении нового слоя.

ГЛАВА 3. Моделирование мультиспектрального сигнала, измеряемого современными ОЭС

"The main thing is to keep the main thing the main thing"

Stephen R. Covey ("The Seven Habits of Highly Effective People")

3.1 Иерархия циклов вызова подпрограммы решения уравнения переноса

В рамках программы NASA Earth Observing System предложена следующая номенклатура для уровней обработки данных дистанционного зондирования [256]. Под уровнем 1 (level 1 data) понимают данные, полученные со спутника, в физических единицах измерения, снабженные маркерами времени. Под уровнем 2 (level 2 data) понимают восстановленную из данных предыдущего уровня информацию о геофизических переменных (в нашем случае это общее содержание озона) с тем же разрешением, как и у данных уровня 1. Схема преобразования данных level 1 – level 2 показана на рисунке 3.1. Фактически предыдущая глава была посвящена оптимизации только одного блока приведенной схемы (RTE solver). Оптические параметры модели атмосферы, служащие входными данными для модуля решения уравнения переноса, рассчитываются по сечениям рассеяния и поглощения для аэрозолей, газов, облаков и релеевского рассеяния с привлечением базы данных HITRAN, базы данных свойств облаков и априорных профилей физических параметров атмосферы, а также дополнительных расчетных модулей (например, код T-matrix [38, 257–259] для расчета рассеяния на несферических частицах).

При обработке спутниковых измерений солвер уравнения переноса вызывается в теле многократно вложенных друг в друга циклов. Данная Глава посвящена методам быстрого моделирования спектральных данных посредством оптимизации и обхода этих циклов. Рассмотрим 3 цикла:

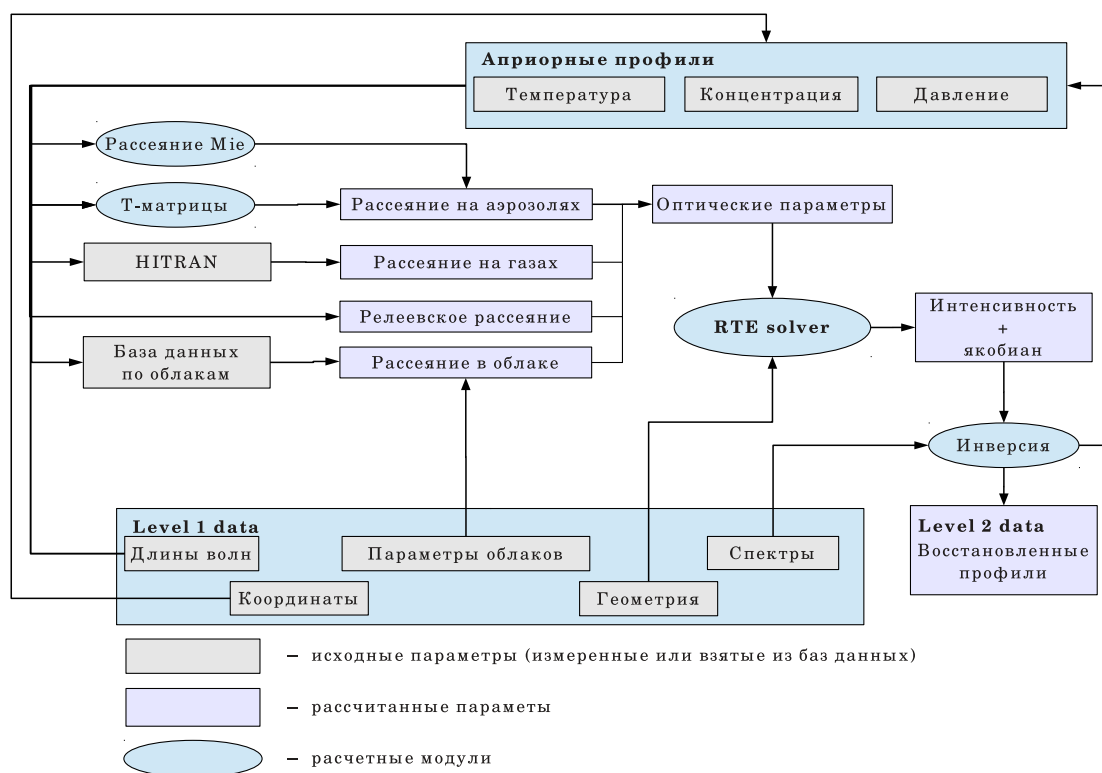


Рисунок 3.1 — Схема потоков данных при обработке данных level 1 → level 2.

1. Цикл по длинам волн: расчет спектра подразумевает вызов солвера уравнения переноса для набора длин волн (в нашем случае 88 длин волн в диапазоне 325–335 нм). Предлагается сократить количество вызовов модели переноса излучения с помощью снижения размерности исходных оптических данных.
2. Цикл по параметру облачности (*cloud fraction*): положение верхней границы облака, оптическая толщина облака и параметр облачности определяется из спектра в интервале 758–778 нм (*Oxygen A-band*); далее, яркость текущего пикселя рассчитывается как линейная комбинация решений для пикселя, полностью покрытого облаком, и для пикселя без облака по формуле (1.33). Ключевая оптимизация этого цикла заключается в использовании промежуточных (временных) массивов, рассчитанных для случая атмосферы без облака, в расчете для атмосферы с облаком.
3. Цикл по наземным пикселям: у инструмента TROPOMI пространственное разрешение 7 км × 7 км, количество обрабатываемых пикселей в единицу времени увеличится на два порядка по сравнению с GOME-2. Для ускорения вычислений предлагается обрабатывать массив пикселей параллельно на графических процессорах.

3.2 Методология снижения размерности исходных данных для расчета спектра

Иногда массив исходных данных содержит избыточную информацию, для обработки которой требуется дополнительное время. Тогда имеет смысл выделить из исходных данных наиболее существенную информацию. Мы рассмотрим метод моделирования гиперспектральных данных, основанный на методах снижения размерности входных оптических данных. Для алгоритмов решения уравнения переноса излучения такими данными являются оптические параметры атмосферы для набора длин волн и слоев. Ускорение расчета спектров основано на представлении исходных данных в новом базисе. Входные данные можно рассматривать как линейное многообразие в многомерном пространстве. Оптимизация основана на переходе к новому базису. В нем можно пренебречь зависимостью оптических параметров вдоль некоторых новых базисных векторов, и, таким образом, снизить размерность исходной задачи. Для построения соответствующего отображения из исходного пространства в редуцированное мы применим метод главных компонент, а также его аналоги: методы локального линейного вложения (*locality pursuit embedding*, *locality preserving projection*, *locally embedded analysis*) и дискретно-ортогональные преобразования (*cosine*, *Legendre*, *wavelet*). Также мы рассмотрим линеаризацию редуцированной модели и проанализируем её применимость к решению практической задачи восстановления профиля озона из измерений в ультрафиолетовом диапазоне.

Как было указано в Главе 1, новое поколение атмосферных сенсоров позволяет осуществлять гипер-спектральные измерения. Можно предложить два подхода к анализу гиперспектральных данных. Первый подход направлен на ускорение решения прямой модели и удачной группировке данных таким образом, чтобы можно было снизить количество вызовов алгоритма решения уравнения переноса. В рамках этого подхода развито несколько методов (*the correlated k distribution* [260], *the exponential sum fitting transmittance* [261], *the radiance sampling method* [262], *the optimal spectral mapping method* [263]). Второй подход основан на снижении размерности. Цель метода – уменьшить число статистически независимых данных с тем, чтобы упростить их анализ. Так, например, в работе [264] рассмотрен алгоритм расчета спектров с применением метода главных компонент на базе модели RTTOV. Алгоритм расчета состоит из следующих шагов:

1. Рассчитывается достаточное большое множество спектров;

2. К рассчитанным спектрам применяется метод главных компонент и определяется система эмпирических ортогональных функций;
3. В дальнейшем, расчет ведется только для некоторых спектральных точек, по которым с помощью эмпирических ортогональных функций восстанавливается спектр в целом.

Авторам удалось ускорить расчет спектра в 8-40 раз. В работах [86, 265] решение обратной задачи построено на методах снижения размерности, которые переводят вектор измерений из исходного пространства в пространство меньшей размерности, в котором и осуществляется инверсия. Однако, данный подход имеет недостатки:

1. Метод требует расчета большого числа спектров;
2. Точность метода, как правило, зависит от исходных данных (например, геометрии измерения);
3. Снижение размерности вектора измерений может привести к тому, что обратная задача будет хуже обусловлена: одному спектру могут соответствовать несколько наборов исходных данных.

Снижение размерности исходных оптических данных [266] принципиально лишено этих недостатков, однако требует построения нетривиального вычислительного алгоритма.

В методе ускорения обработки измерений SCIAMACHY, описанном в [267], спектр I в ультра-фиолетовой области находится из соотношения

$$\ln \frac{I(\lambda, \xi)}{I_a(\lambda, \xi)} = f_I(\lambda, \xi), \quad (3.1)$$

где ξ – вектор параметров атмосферы, подлежащих определению, $I_a(\lambda, \xi)$ – спектр, рассчитанный с помощью приближенной модели переноса излучения (например, с помощью двухпоточкового приближения или модели однократного рассеяния), f_I – поправочный коэффициент. Для ускорения расчета поправочный коэффициент рассчитывается один раз для начального приближения ξ_0 и затем используется на следующих итерациях алгоритма инверсии:

$$f_I(\lambda, \xi) = f_I(\lambda, \xi_0).$$

Более точное приближение основано на представлении поправочного коэффициента в виде

$$f_I(\lambda, \xi) = P_\xi(\lambda) f_I(\lambda, \xi_0) + Q_\xi(\lambda),$$

где P_ξ и Q_ξ – полиномы малой степени по λ . Коэффициенты полиномов рассчитываются на каждой итерации из условия минимизации невязки уравнения (3.1) для прямой модели для некоторых длин волн. К сожалению, этот метод приводит к существенной потере точности для атмосферы с облаком или аэрозолем с большой оптической толщиной.

V. Natraj обратил внимание на то, что разница между решением уравнения переноса в двухпотоковом приближении и точным решением в некоторых практически важных случаях (в частности при расчете полосы O2A-band) может быть описана полиномиальной зависимостью малой степени [268, 269]. Развитием этой идеи стал метод ускорения расчета спектра для поглощающей и рассеивающей атмосферы со следующими особенностями:

1. Для расчета условно точного спектра используется метод дискретных ординат с достаточным количеством дискретных ординат (далее мы его будем называть многопотоковым, следуя работе [270]). Для расчета приближенного спектра используется двухпотоковое приближение, которое на порядок быстрее многопотокового.
2. Метод главных компонент используется для уменьшения размерности не пространства измерений, а пространства исходных данных – оптических параметров атмосферы.
3. Зависимость поправочного коэффициента $f_T(\lambda, \xi)$ от оптических параметров описывается разложением в ряд Тейлора около средних значений оптических параметров с удержанием двух членов разложения.

В работе [268] расчет спектра с помощью этого метода в диапазоне oxygen A-band был ускорен на порядок при сохранении точности 0.3%. Линеаризованная версия модели переноса с методом главных компонент, а также его применение для определения концентрации озона по измерениям инструментом GOME описаны в работе [270]. Авторы получили ускорение 3.5-4 раза при сохранении точности расчета яркости 0.5%.

Следует отметить, что метод главных компонент не всегда эффективно снижает размерность при заданных ограничениях на точность. Причина заключается в том, что метод использует систему базисных функций, которая ортогональна по построению. В некоторых случаях требование ортогональности может оказаться избыточным и даже ухудшить точность преобразования. Например, данные могут с хорошей точностью следовать некой нелинейной зависимости со сложной геометрией в исходном пространстве данных. В этом случае метод главных компонент потребует много компонент для достижения приемлемой точности или вообще не приведет к снижению размерности. Для аккуратного описания нелинейных множеств существуют нелинейные методы снижения размерности. Но для них не существует

обратного преобразования. Поэтому нелинейные методы используются в приложениях, где исходное множество не представляет интереса после сжатия (например, при сжатии изображений или видео-файлов). Альтернативой служат локально-линейные методы, которые точнее воспроизводят нелинейную структуру массива данных и имеют обратное преобразование.

Ниже мы рассмотрим модель переноса, использующую метод снижения размерности, и обобщим модель, описанную в [268, 269], на локально-линейные методы. Также ниже описана соответствующая ей линеаризованная модель и проанализированы различные методы снижения размерности с точки зрения скорости счета и точности на примере расчета спектра в диапазоне 325–335 нм для инструмента GOME.

3.3 Модель переноса излучения со снижением размерности исходных данных

Рассмотрим модель атмосферы, содержащую O_3 , NO_2 , и H_2O и однородный слой с облаком. Предположим, что свойства облачного слоя постоянны на выбранном спектральном интервале. Таким образом, параметрами, зависящими от длины волны излучения, являются коэффициент поглощения молекулами газа $\sigma_{abs}^{gas}(\lambda, z)$, коэффициент рассеяния молекулами воздуха $\sigma_{sct}^{mol}(\lambda, z)$, релеевская индикатриса рассеяния $P_{Ray}(\lambda, z)$ и альбеда поверхности $A(\lambda)$. Разобьем атмосферу на L слоев и определим, как в [49, 268, 270], вектор \mathbf{x}_w , содержащий $N = 2L + 1$ элементов, для каждой длины волны λ_w , как

$$\mathbf{x}_w^T = [\ln \sigma_{abs1}^{gas}(\lambda_w), \dots, \ln \sigma_{absL}^{gas}(\lambda_w), \ln \sigma_{sct1}^{mol}(\lambda_w), \dots, \ln \sigma_{sctL}^{mol}(\lambda_w), \ln A(\lambda_w)], \quad (3.2)$$

где $\sigma_{absk}^{gas}(\text{км}^{-1})$ и $\sigma_{sctk}^{mol}(\text{км}^{-1})$ – коэффициенты поглощения и рассеяния в k -том слое, соответственно. Вектор \mathbf{x}_w содержит все параметры, которые зависят от длины волны. Таким образом, мы имеем однозначное соответствие дискретного множества оптических параметров $\{\mathbf{x}_w\}_{w=1}^W$ множеству длин волн $\{\lambda_w\}_{w=1}^W$, где W – число точек спектра. Заметим, что обычно $N < W$. На рисунке 3.2 показаны первые пять и последние пять векторов \mathbf{x}_w для модели, описанной в части 2.2.5. При этом $W = 88$ и $L = 15$. Из рисунка становится очевидно, что коэффициент рассеяния зависит от длины волны слабее, чем коэффициент поглощения.

Часто многомерные данные расположены в пространстве близко к линейному многообразию меньшей размерности. Задачами методов снижения размерности являются модели-

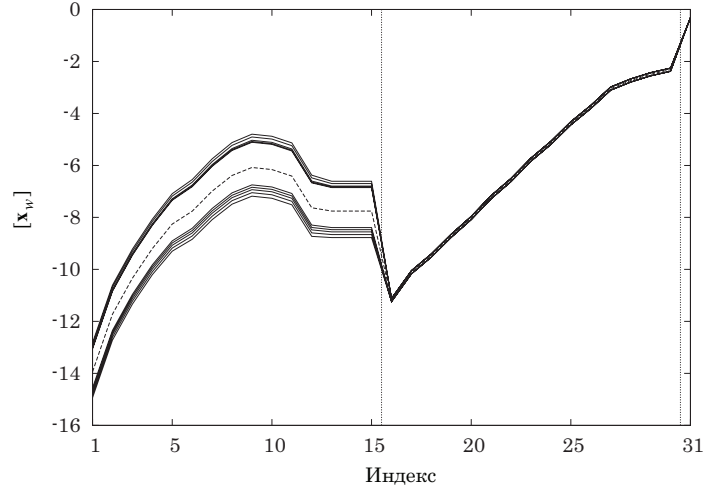


Рисунок 3.2 — Несколько векторов \mathbf{x}_w для задачи восстановления озона, описанной в части 3.6.1. Непрерывные линии соответствуют различным значениям длин волн из интервала 325–335 нм. Пунктирная линия соответствует усредненным значениям. Вертикальные линии показывают разрывы в элементах \mathbf{x}_w при переходе от коэффициентов поглощения (элементы с 1 по 15) к коэффициентам рассеяния (элементы с 16 по 30) и от коэффициентов рассеяния к альбедо поверхности.

рование геометрической структуры линейного многообразия и построение соответствующей проекции данных [271]. Для множества N -мерных данных $\{\mathbf{x}_w\}_{w=1}^W$, где $\mathbf{x}_w \in \mathbb{R}^N$, определим средний вектор как

$$\bar{\mathbf{x}} = (1/W) \sum_{w=1}^W \mathbf{x}_w. \quad (3.3)$$

Нашей целью является нахождение M -мерного подпространства, образованного линейно независимыми векторами $\{\mathbf{a}_k\}_{k=1}^M$, такого что центрированные данные $\mathbf{x}_w - \bar{\mathbf{x}}$ в основном находились бы в этом подпространстве (образовывали бы линейное многообразие размерности M):

$$\mathbf{x}_w \approx \bar{\mathbf{x}} + \sum_{k=1}^M y_{wk} \mathbf{a}_k = \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{A} \mathbf{y}_w, \quad w = 1, \dots, W. \quad (3.4)$$

где $\mathbf{A} \equiv [\mathbf{a}_k]_{k=1}^M$ — матрицы размерности $N \times M$, столбцы которой равны \mathbf{a}_k , y_{wk} — k -ый элемент вектора $\mathbf{y}_w \in \mathbb{R}^M$. При этом преобразование считается удачным, если $M < N < W$.

В теории снижения размерности матрица \mathbf{A} описывает обратное отображение из пространства меньшей размерности в пространство большей размерности. Вектор \mathbf{y}_w получается путем отображения центрированного вектора исходных данных $\mathbf{x}_w - \bar{\mathbf{x}}$ из пространства боль-

шей размерности в пространство меньшей размерности,

$$\mathbf{y}_w = \mathbf{A}^\dagger (\mathbf{x}_w - \bar{\mathbf{x}}), \quad (3.5)$$

где $\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$ – псевдо-обратная матрица \mathbf{A} .

Пусть $f(\mathbf{x}_w)$ – скалярная функция, допускающая разложение в ряд Тейлора. Вводя приращение к $\bar{\mathbf{x}}$ как

$$\Delta \mathbf{x}_w = \sum_{k=1}^M y_{wk} \mathbf{a}_k, \quad (3.6)$$

мы аппроксимируем $f(\mathbf{x}_w)$ разложением в ряд Тейлора около $\bar{\mathbf{x}}$:

$$f(\mathbf{x}_w) \approx f(\bar{\mathbf{x}} + \Delta \mathbf{x}_w) \approx f(\bar{\mathbf{x}}) + \Delta \mathbf{x}_w^T \nabla f(\bar{\mathbf{x}}) + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{x}_w^T \nabla^2 f(\bar{\mathbf{x}}) \Delta \mathbf{x}_w, \quad (3.7)$$

где ∇f и $\nabla^2 f$ – градиент (матрица Якоби от f) и гессиан f , соответственно. Для $\mathbf{a}_k = \|\mathbf{a}_k\| \hat{\mathbf{a}}_k$, где $\|\mathbf{a}_k\|$ – модуль вектора \mathbf{a}_k и $\hat{\mathbf{a}}_k$ – единичный вектор, мы используем представление (3.6) для того, чтобы выразить второе и третье слагаемые в уравнении (3.7):

$$\Delta \mathbf{x}_w^T \nabla f(\bar{\mathbf{x}}) = \sum_{k=1}^M y_{wk} \|\mathbf{a}_k\| \frac{\partial f}{\partial \hat{a}_k}(\bar{\mathbf{x}}), \quad (3.8)$$

$$\Delta \mathbf{x}_w^T \nabla^2 f(\bar{\mathbf{x}}) \Delta \mathbf{x}_w = \sum_{k=1}^M \sum_{l=1}^M y_{wk} y_{wl} \|\mathbf{a}_k\| \|\mathbf{a}_l\| \frac{\partial^2 f}{\partial \hat{a}_k \partial \hat{a}_l}(\bar{\mathbf{x}}), \quad (3.9)$$

соответственно. Для упрощения вычислений мы пренебрежем смешанными производными в (3.9). Производные первого и второго порядков заменим формулами центральных разностей:

$$\frac{\partial f}{\partial \hat{a}_k}(\bar{\mathbf{x}}) \approx \frac{f(\bar{\mathbf{x}} + h \hat{\mathbf{a}}_k) - f(\bar{\mathbf{x}} - h \hat{\mathbf{a}}_k)}{2h}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \hat{a}_k^2}(\bar{\mathbf{x}}) \approx \frac{f(\bar{\mathbf{x}} + h \hat{\mathbf{a}}_k) - 2f(\bar{\mathbf{x}}) + f(\bar{\mathbf{x}} - h \hat{\mathbf{a}}_k)}{h^2}, \quad (3.11)$$

соответственно. Положим $h = \|\mathbf{a}_k\|$. Тогда

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_w) &\approx f(\bar{\mathbf{x}}) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^M [f(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{a}_k) - f(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}_k)] y_{wk} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^M [f(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{a}_k) - 2f(\bar{\mathbf{x}}) + f(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}_k)] y_{wk}^2. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Прделанные рассуждения справедливы, в частности, и для $f(\mathbf{x}_w) = f_{\mathbf{I}}(\lambda_w) = \ln[I(\lambda_w)/I_{\mathbf{a}}(\lambda_w)]$, где $I_{\mathbf{a}}$ – спектр, рассчитанный в двухпотоковом приближении. Из выражения (3.12) становится очевидно, что расчет корректирующей функции требует $2M+1$ вызовов многопотоковой модели и $2M+1$ вызовов двухпотоковой модели. Принимая во внимание то, что $M \ll W$, мы получаем значительное уменьшение времени счета. Та же идеология лежит в основе расчета производных от функции яркости по параметру атмосферы ξ_i . Мы определяем корректирующую функцию по аналогии с уравнением (3.1):

$$f_{\xi_i}(\lambda_w) = \ln \left[\frac{\partial I}{\partial \xi_i}(\lambda_w) / \frac{\partial I_{\mathbf{a}}}{\partial \xi_i}(\lambda_w) \right]. \quad (3.13)$$

Альтернативный метод линеаризации предложен в работе [270]. Этот подход основан на линеаризации уравнения (3.12) для корректирующей функции $f_{\mathbf{I}}$ и включает в себя расчет производных $\partial \mathbf{a}_k / \partial \xi_i$ и $\partial y_{wk} / \partial \xi_i$.

На рисунке 3.3 показана блок-схема, описывающая алгоритм расчета спектра с применением метода снижения размерности. В двойных рамках показаны блоки, занимающие наибольшее время счета: расчет матрицы отображения и вызов многопотокового алгоритма $2M+1$ раз. Приведенная схема справедлива для любой техники снижения размерности. Аналогично выглядит алгоритм для расчета матрицы Якоби.

Далее мы рассмотрим некоторые методы снижения размерности. Мы ограничим наш анализ методом главных компонент, локально-линейными и дискретно-ортогональными методами. Будем считать, что все центрированные данные $\mathbf{x}_w \leftarrow \mathbf{x}_w - \bar{\mathbf{x}}$, $w = 1, \dots, W$, являются столбцами матрицы \mathbf{X} размерностью $N \times W$, то есть $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_w]_{w=1}^W$.

3.4 Методы локального линейного вложения

Метод главных компонент (*the principal component analysis* – PCA) [272,273] осуществляет снижение размерности с помощью проецирования исходного множества данных размерности N в M -мерное подпространство, построенное на главных собственных векторах ковариационной матрицы исходных данных как на базисных. Рассмотрим спектральное разложение ковариационной матрицы

$$\mathbf{C}_{\mathbf{x}} = (1/W) \mathbf{X} \mathbf{X}^T = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{U}^T,$$

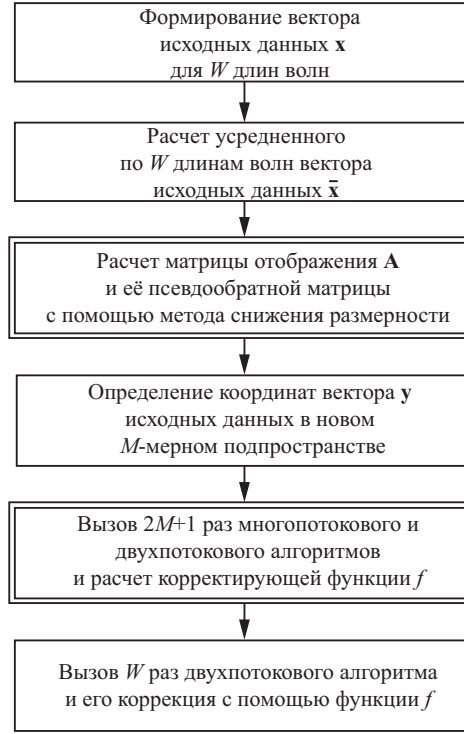


Рисунок 3.3 — Блок-схема алгоритма расчета спектра с помощью методов снижения размерности. В двойных рамках показаны блоки, занимающие наибольшее время счета.

где $\Sigma = \text{diag}[\sigma_k]_{k=1}^N$ — диагональная матрица размерности $N \times N$, у которой на главной диагонали расположены сингулярные числа в порядке убывания $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_N > 0$, и $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_k]_{k=1}^N$ — ортогональная (или ортонормированная) матрица размерности $N \times N$ сингулярных векторов \mathbf{u}_k ¹. Далее, $\mathbf{A} = \mathbf{U}_M = [\mathbf{u}_k]_{k=1}^M$, причем, $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{U}_M^T$. Также как в [268, 269], перейдем к масштабированным ортогональным векторам $\bar{\mathbf{u}}_k = \sigma_k \mathbf{u}_k$. Тогда $\mathbf{A} = \bar{\mathbf{U}}_M = \mathbf{U}_M \Sigma_M$ и $\mathbf{A}^\dagger = \bar{\mathbf{U}}_M^\dagger = \Sigma_M^{-1} \mathbf{U}_M^T$, где $\Sigma_M = \text{diag}[\sigma_k]_{k=1}^M$.

Метод главных компонент осуществляет глобально-линейное преобразование. И хотя при выводе основных соотношений и его обосновании не делаются специальные допущения о геометрии данных, метод эффективно снижает размерность, когда множество расположено близко к линейной структуре (например, в двухмерном случае, когда данные лежат близко к некоторой прямой). Он воспроизводит структуру данных в целом, но плохо воспроизводит локальные нелинейности множества. Напротив, *the locality pursuit embedding* (LPE) [275], *the locality preserving projection* (LPP) [276], и *the locally embedded analysis* (LEA) [277] сформулированы в идеологии локально-линейных преобразований, которые максимально сохра-

¹Так как $\mathbf{C}_x = (1/W) \mathbf{X} \mathbf{X}^T$ — симметричная матрица, то $\mathbf{C}_x = \mathbf{C}_x^T$ и согласно спектральной теореме \mathbf{C}_x имеет действительные собственные значения $\Rightarrow \mathbf{U} \Sigma \mathbf{U}^{-1} = (\mathbf{U} \Sigma \mathbf{U}^{-1})^T \Rightarrow \mathbf{U} \Sigma \mathbf{U}^{-1} = (\mathbf{U}^{-1})^T \Sigma \mathbf{U}^T \Rightarrow \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T$. Хотя формально задачи сингулярного разложения матрицы данных и спектрального разложения ковариационной матрицы совпадают, алгоритмы вычисления сингулярного разложения напрямую, без вычисления ковариационной матрицы и её спектра, более эффективны и устойчивы (см. лекцию №31 в [274]).

няют локальные особенности структуры данных. Эти методы сходны с методом локально-линейного погружения (*the locally linear embedding* (LLE)) [278], в котором глобальная нелинейная структура воспроизводится с помощью локальных линейных приближений. Например, метод LPE применяет метод главных компонент в некоторой локальной области для построения в ней касательной плоскости в M -размерном подпространстве.

Методы LPE, LPP и LEA позволяют рассчитывать линейные отображения \mathbf{A} и \mathbf{A}^\dagger . Обозначим за $\mathcal{X}(w) = \{\mathbf{x}_{N(j)}^{(w)}\}_{j=1}^k$ множество k ближайших соседей вектора \mathbf{x}_w в смысле евклидова расстояния. Тогда соответствующие алгоритмы построения отображения включают следующие шаги:

А. Алгоритм LPE:

1. Инициализируется матрица $\mathbf{L} = \mathbf{0}$ размерности $W \times W$.
2. Для $w = 1, \dots, W$, формируется диагональная матрица $\mathbf{D}_w = \text{diag}[I_{v \in \mathcal{X}(w)}]_{v=1}^W$, где $I_{v \in \mathcal{X}(w)}$ – это индикатор-функция, определенная как $I_{v \in \mathcal{X}(w)} = 1$ если $\mathbf{x}_v \in \mathcal{X}(w)$, и $I_{v \in \mathcal{X}(w)} = 0$ в противном случае.
3. Для $w = 1, \dots, W$ матрица \mathbf{L} пересчитывается рекурсивно $\mathbf{L} \leftarrow \mathbf{L} + \mathbf{D}_w - (1/k) \mathbf{D}_w \mathbf{E} \mathbf{E}^T \mathbf{D}_w^T$, где \mathbf{E} – вектор такой же размерности как и W , состоящий только из единиц.
4. Вычисляется сингулярное разложение симметричной и неотрицательно определенной матрицы $\mathcal{A} = \mathbf{X} \mathbf{L} \mathbf{X}^T = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{U}^T$, и, также как в методе главных компонент, матрица \mathbf{A} формируется из M сингулярных векторов, соответствующих максимальным сингулярным числам, т.е. $\mathbf{A} = \mathbf{U}_M \mathbf{\Sigma}_M^{1/2}$ и $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{\Sigma}_M^{-1/2} \mathbf{U}_M$.

В. Алгоритм LPP:

1. Для $w, v = 1, \dots, W$ рассчитываются элементы W_{wv} разреженной матрицы \mathbf{W} размерности $W \times W$ как

$$\begin{aligned} W_{wv} &= \exp(-\|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_v\|^2 / t^2), \text{ если } \mathbf{x}_v \in \mathcal{X}(w), \\ W_{wv} &= 0, \text{ если } \mathbf{x}_v \notin \mathcal{X}(w). \end{aligned}$$

Параметр t можно выбрать как $t = q \min_{\mathbf{x}_v \in \mathcal{X}(w)} \|\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_v\|$, $q \leq 1$. Также можно положить $W_{wv} = 1$, если $\mathbf{x}_v \in \mathcal{X}(w)$, и $W_{wv} = 0$ в противном случае.

2. Рассчитываются элементы диагональной матрицы $\mathbf{D} = \text{diag}[D_v]_{v=1}^W$ как суммы по соответствующим столбцам матрицы \mathbf{W} , т.е. $D_v = \sum_w W_{wv}$, и матрица Кирхгофа (Laplacian matrix) $\mathbf{L} = \mathbf{D} - \mathbf{W}$.
3. Для $\mathcal{A} = \mathbf{X}\mathbf{L}\mathbf{X}^T$ и $\mathcal{B} = \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^T$ решается обобщенная задача на собственные значения $\mathcal{A}\mathbf{z}_k = \lambda_k\mathcal{B}\mathbf{z}_k$ следующим образом: (а) выполняется сингулярное разложение матрицы $\mathcal{B} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}^T$, вычисляется матрица $\mathcal{D} = \mathbf{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{U}^T$ и обратная её матрица $\mathcal{D}^{-1} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}^{1/2}$; (б) выполняется факторизация матрицы $\mathcal{C} = \mathcal{D}\mathcal{A}\mathcal{D}^T$ с помощью сингулярного разложения $\mathcal{C} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^T$. Тогда собственные значения λ_k являются сингулярными значениями матрицы \mathcal{C} , а собственные вектора \mathbf{z}_k связаны с сингулярными векторами \mathbf{v}_k матрицы \mathcal{C} соотношениям $\mathbf{z}_k = \mathcal{D}^T\mathbf{v}_k$. Заметим, что если \mathcal{B} – сингулярная матрица ранга r , мы определяем матрицу $\mathbf{\Sigma}^{-1/2} = \text{diag}[\varsigma_k]_{k=1}^N$, где $\varsigma_k = \sigma_k^{-1/2}$ для $k \leq r$ и $\varsigma_k = 0$ в противном случае.
4. Рассчитывается матрицы отображения $\mathbf{A} = \mathcal{D}^{-1}\mathbf{V}_M$ и $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{V}_M^T\mathcal{D}$, где $\mathbf{V}_M = [\mathbf{v}_{k+N-M}]_{k=1}^M$ и \mathbf{v}_k – k -ый столбец матрицы \mathbf{V} .

С. Алгоритм LEA:

1. Вычисляются элементы разреженной $W \times W$ матрицы \mathbf{W} : (а) для $w = 1, \dots, W$, определяются элементы G_{ij} матрицы \mathbf{G} размерности $k \times k$ как $G_{ij} = (\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_{N(i)}^{(w)})^T (\mathbf{x}_w - \mathbf{x}_{N(j)}^{(w)})$; (б) кладется $W_{wN(j)} = w_j$, где w_j – элемент вектора $\mathbf{w} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{E} / (\mathbf{E}^T\mathbf{G}^{-1}\mathbf{E})$ размерности k .
2. Рассчитывается диагональная матрица $\mathbf{D} = \text{diag}[D_v]_{v=1}^W$, где $D_v = \sum_w W_{wv}$.
3. Также как и в алгоритме LPP, решается обобщенная задача на собственные значения $\mathcal{A}\mathbf{z}_k = \lambda_k\mathcal{B}\mathbf{z}_k$ для $\mathcal{A} = \mathbf{X}(\mathbf{D} - \mathbf{W})^T(\mathbf{D} - \mathbf{W})\mathbf{X}^T$ и $\mathcal{B} = \mathbf{X}(\mathbf{D}^T\mathbf{D} + \mathbf{W}^T\mathbf{W})\mathbf{X}^T$.
4. Рассчитываются матрицы отображения $\mathbf{A} = \mathcal{D}^{-1}\mathbf{V}_M$ и $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{V}_M^T\mathcal{D}$, где $\mathbf{V}_M = [\mathbf{v}_{k+N-M-1}]_{k=1}^M$.

Подход, описанный в [268, 269], также можно считать локально-линейным. Он сочетает метод главных компонент и кластеризацию в пространстве входных данных. Локально-линейный вариант метода главных компонент состоит из двух шагов [279]: (1) кластеризация пространства данных на непересекающиеся регионы и (2) осуществление линейных отображений в каждом регионе с помощью метода главных компонент. Тогда каждый регион (диапазон длин волн) имеет свой ортогональный базис, и, следовательно, свои корректирующие функции f .

Для их расчета в P непересекающихся регионах необходимо $(2M + 1)P$ вызовов многопоточковой и двухпоточковой моделей.

3.5 Дискретно-ортогональные преобразования

Дискретно-ортогональные преобразования также могут быть использованы для снижения размерности. Далее мы рассмотрим дискретное косинусное преобразование (*the discrete cosine transform* (DCT)) [280], дискретное преобразование Лежандра (*the discrete Legendre transform* (DLT)) [281] и дискретное вейвлет-преобразование (*the discrete wavelet transform* (DWT)) [282].

Дискретный набор ортонормированных базисных функций $\{P_k\}_{k=1}^N$ называется ортонормированным на дискретном интервале $\{1, 2, \dots, N\}$, если

$$\sum_{i=1}^N P_k(i) P_l(i) = \delta_{kl}.$$

Вектор-столбец \mathbf{a}_k может быть выбран как $\mathbf{a}_k = [P_k(1), \dots, P_k(N)]^T$, при этом $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_k]_{k=1}^M$, $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^T$. Дискретно-косинусные базисные функции получаются из ортонормированных полиномов Чебышева и могут быть вычислены как

$$C_k(i) = c_k \cos \left[\frac{(2i-1)\pi}{2N} (k-1) \right], \quad i, k = 1, \dots, N, \quad (3.14)$$

где $c_k = 1/\sqrt{N}$ для $k = 0$, и $c_k = 2/\sqrt{N}$ для $k > 0$. Дискретные полиномы Лежандра определяются рекуррентным соотношением [283]:

$$\begin{aligned} L_1(i) &= \frac{1}{\sqrt{N}}, \\ L_2(i) &= (2i - N - 1) \sqrt{\frac{3}{N(N^2 - 1)}}, \\ L_{k+1}(i) &= [\alpha_1(k)(i-1) + \alpha_2(k)] L_k(i) - \alpha_3(k) L_{k-1}(i), \quad k = 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (3.15)$$

где

$$\alpha_1(k) = \frac{2}{k} \sqrt{\frac{4k^2 - 1}{N^2 - k^2}}, \quad \alpha_2(k) = \frac{1 - N}{k} \sqrt{\frac{4k^2 - 1}{N^2 - k^2}},$$

$$\alpha_3(k) = \frac{k-1}{k} \sqrt{\frac{2k+1}{2k-3}} \sqrt{\frac{N^2 - (k-1)^2}{N^2 - k^2}}.$$

Вейвлеты Добеши (*the Daubechies wavelets*) D2A – семейство ортогональных вейвлетов, характеризуются максимальным числом обращающихся в нуль моментов A для заданного числа коэффициентов $2A$. Вейвлеты Добеши не имеют аналитического представления. Тем не менее, вейвлет-преобразование можно осуществить с помощью так называемого пирамидального алгоритма (*the pyramidal algorithm*) [284]. Вообще говоря, дискретное вейвлет-преобразование является линейным преобразованием входного сигнала \mathbf{x}_w и может быть представлено через матрицу преобразования \mathbf{W} размерности $N \times N$ как $\mathbf{z}_w = \mathbf{W}\mathbf{x}_w$. Матрица \mathbf{W} может быть построена по столбцам, применяя алгоритм дискретного вейвлет-преобразования к единичным векторам. Для вейвлетов Добеши матрица преобразования является ортогональной; таким образом, $\mathbf{x}_w = \mathbf{W}^T \mathbf{z}_w$. Вейвлет-преобразование обрывается по амплитуде элементов z_{wk} вектора \mathbf{z}_w . Поэтому для вектора \mathbf{y}_w , содержащего M наибольших элементов \mathbf{z}_w , мы вводим матрицу \mathbf{S} размерности $M \times N$, такую что $\mathbf{y}_w = \mathbf{S}\mathbf{z}_w$. Тогда матрица отображения рассчитывается как $\mathbf{A} = \mathbf{W}^T \mathbf{S}^T$, и, с учетом $\mathbf{S}\mathbf{S}^T = \mathbf{I}_M$, $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{S}\mathbf{W}$.

Вектор \mathbf{x}_w включает в себя массив коэффициентов поглощения, массив коэффициентов рассеяния и альbedo поверхности. Поэтому в \mathbf{x}_w присутствуют два разрыва (см. рисунок 3.2). Ортонормированные базисные функции являются «гладкими» и не могут с необходимой точностью описать скачки в \mathbf{x}_w . Чтобы обойти эту проблему, мы исключим альbedo поверхности из \mathbf{x}_w и будем использовать его среднее значение при расчете корректирующей функции. В результате вектор \mathbf{x}_w состоит из двух частей $\mathbf{x}_w^T = [\mathbf{x}_w^{(1)T}, \mathbf{x}_w^{(2)T}]$, $p = 1, 2$, где $\mathbf{x}_w^{(p)}$ – вектор размерности N_p и $N = N_1 + N_2$. Для того чтобы воспользоваться свойством локальной аппроксимации ортонормированными базисными функциями, для каждого набора $(\mathbf{x}_w^{(p)}, \bar{\mathbf{x}}^{(p)}, N_p)$ мы определяем соответствующую систему $(\mathbf{a}_k^{(p)}, \mathbf{y}_w^{(p)}, M_p)$ и делаем соответствующее объединение

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}_w^{(1)} \\ \mathbf{x}_w^{(2)} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{x}}^{(1)} \\ \bar{\mathbf{x}}^{(2)} \end{bmatrix} + \sum_{k=1}^{M_1} y_{wk}^{(1)} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_k^{(1)} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} + \sum_{k=1}^{M_2} y_{wk}^{(2)} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{a}_k^{(2)} \end{bmatrix}. \quad (3.16)$$

Используя обозначения

$$\mathbf{a}_k^{(1)} \leftarrow \begin{bmatrix} \mathbf{a}_k^{(1)} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_k^{(2)} \leftarrow \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{a}_k^{(2)} \end{bmatrix},$$

можно переписать выражение (3.16) в общем виде следующим образом:

$$\mathbf{x}_w \approx \bar{\mathbf{x}} + \sum_{p=1}^P \sum_{k=1}^{M_p} y_{wk}^{(p)} \mathbf{a}_k^{(p)}, \quad (3.17)$$

где P – номер вектора. Применяя рассуждения, аналогичные приведенным в пункте 3.3, мы получаем

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}_w) \approx f(\bar{\mathbf{x}}) + \frac{1}{2} \sum_{p=1}^P \sum_{k=1}^{M_p} \left[f(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{a}_k^{(p)}) - f(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}_k^{(p)}) \right] y_{wk}^{(p)} \\ + \frac{1}{2} \sum_{p=1}^P \sum_{k=1}^{M_p} \left[f(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{a}_k^{(p)}) - 2f(\bar{\mathbf{x}}) + f(\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{a}_k^{(p)}) \right] y_{wk}^{(p)2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

В этом случае очевидно, что для расчета корректирующих функций требуются $2 \sum_{p=1}^P M_p + 1$ вызовов многопоточковой и столько же двухпоточковой моделей.

3.6 Сравнительный анализ методов снижения размерности

3.6.1 Описание прямой модели

В этом разделе мы рассмотрим применение методов снижения размерности исходных данных для модели атмосферы, используемой в алгоритме восстановления озона GOME Data Processor (GDP) Version 5 [151] для моделирования сигнала в полосе Хюггинса, а также проанализируем их с точки зрения точности и ускорения решения прямой и обратной задач. Для этого выбрано 40 пикселей одной GOME орбиты (9 марта 1999 г). Расчеты выполнены в интервале длин волн 325–335 нм, содержащем $W = 88$ спектральных точек (что соответствует разрешению GOME ~ 0.11 нм). В расчетной модели атмосфера содержит $L = 15$ слоев. Каждый слой характеризуется коэффициентами рассеяния и поглощения. Атмосфера имеет один облачный слой. Для нахождения параметра облачности используется алгоритм OCRA (Optical Cloud Recognition Algorithm) [285]. Для определения положения верхней границы облака и альbedo облака используется алгоритм ROCINN [286]. Далее, следуя работе [102], предполагая геометрическую толщину облака 1 км, мы находим оптическую толщину облака из функции отражения при длине волны 760 нм. В расчете использована модель «simulus

polluted cloud» с модифицированным гамма-распределением по размерам частиц [39]

$$p(a) \propto a^\alpha \exp \left[-\frac{\alpha}{\gamma} \left(\frac{a}{a_{\text{mod}}} \right)^\gamma \right].$$

Размеры частиц лежат в диапазоне $0.02 \div 50.0$ мкм. Параметры распределения $a_{\text{mod}} = 3.53$ мкм, $\alpha = 8$, $\gamma = 2.15$.

Многопоточная модель основана на методе дискретных ординат с матричной экспонентой DOME и использует 8 дискретных ординат в полусфере. В качестве двухпоточной модели используется двухпоточная версия DOME, в которой собственные векторы и собственные значения вычисляются аналитически, а система уравнений для всей атмосферы решается с помощью пентагонального солвера [287]. Оба метода используются для расчета вклада многократного рассеяния в функцию отражения на верхней границе атмосферы. Корректирующая функция $f(\lambda)$ применяется только для многократного рассеяния. Вклад однократного рассеяния при этом рассчитывается для всех длин волн.

Процедура инверсии включает в себя регуляризацию Тихонова и организована также, как в алгоритме восстановления озона GOME Data Processor (GDP) Version 5 [151]. Используется модель внутреннего замыкания, в которой зависимость альбедо поверхности от длины волны описывается полиномом малой степени. Полиномиальные коэффициенты определяются в процессе инверсии. Таким образом, вектор, определяемый в процессе инверсии, состоит из общего содержания озона в атмосферном столбе, набора полиномиальных коэффициентов для альбедо поверхности, температурного сдвига, параметров для Ring-коррекции и сдвига по длинам волн (см. пункт 1.5.1).

3.6.2 Точность и время счета методов локального линейного вложения

На рисунке 3.4 показана относительная ошибка при расчете спектра с помощью методов линейного вложения. За точное решение принят спектр, рассчитанный с помощью многопоточного алгоритма с 16 дискретных ординат в полусфере. При $M = 2$ максимальная относительная ошибка меньше 0.002, при этом методы локального линейного вложения точнее метода главных компонент. Для проверки метода линеаризации, описанного в части 3.3, также рассчитаны относительные ошибки в элементах матрицы Якоби. Результаты показаны на рисунке 3.5. При сохранении двух и более главных компонент ($M \geq 2$) относительная ошибка меньше 0.002. Также рассчитана относительная ошибка в содержании озона в ат-

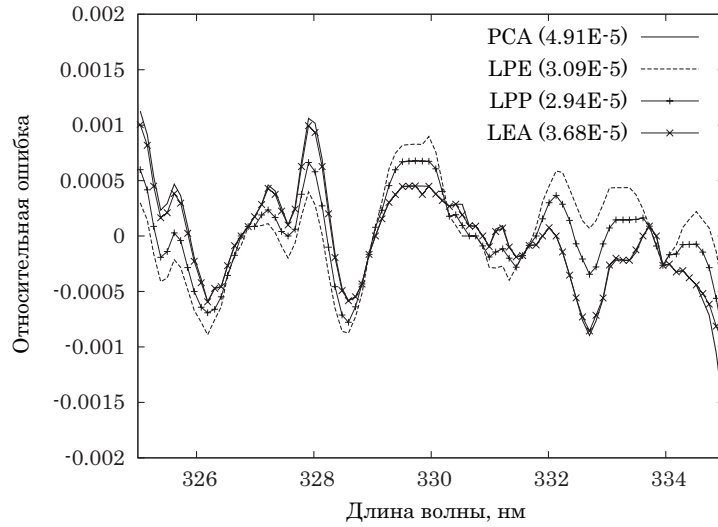


Рисунок 3.4 — Относительная ошибка в расчете спектра с помощью методов линейного вложения при сохранении $M = 2$ главных компонент. Числа в круглых скобках показывают среднеквадратичное отклонение.

мосферном столбе (*ozone total column*), определенном на основе многопоточковой модели и с использованием методов снижения размерности. В таблице 3.1 показаны среднеквадратичное отклонение (СКО), максимальная ошибка и время счета (CPU), усредненные по 40 случаям при различных углах наблюдения. Ошибка метода слабо зависит от угла зондирования, однако не превышает 0.02 % для расчета яркости при угле зондирования 70. Из приведенных данных следует, что

1. для $M \geq 2$ максимальная относительная ошибка меньше 0.006.
2. самым точным методом из рассмотренных является метод LPP, причем метод PCA обладает наименьшей точностью: при $M \geq 2$, среднеквадратичное отклонение метода LPP приблизительно в два раза меньше, чем среднеквадратичное отклонение метода PCA.
3. самым быстрым методом из рассмотренных является метод PCA, самым медленным — метод LPP. При $M \geq 2$ расчет спектра с применением метода главных компонент в 6.24-8.06 раз быстрее, чем классический многопоточковый алгоритм и в 1.05-1.08 раз быстрее метода LPP.

Время расчета с помощью многопоточковой модели составляет 344.56 секунд.

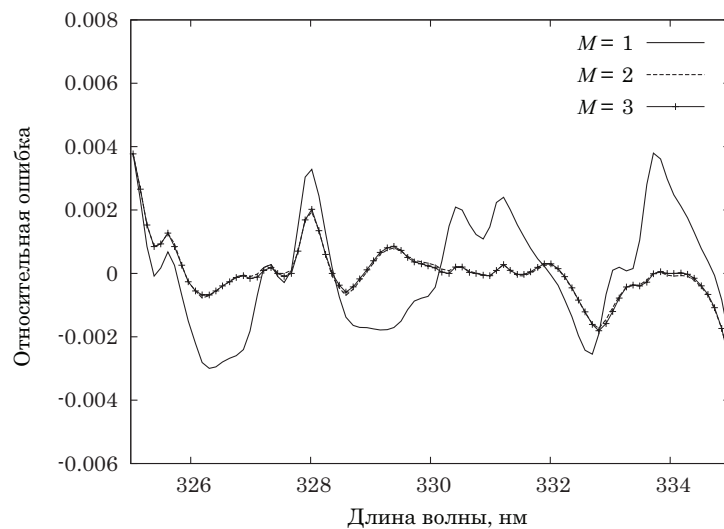


Рисунок 3.5 — Относительная ошибка при расчете матрицы Якоби с помощью метода главных компонент при сохранении $M = 1$, $M = 2$ и $M = 3$ главных компонент — производная по общему содержанию озона в атмосферном столбе .

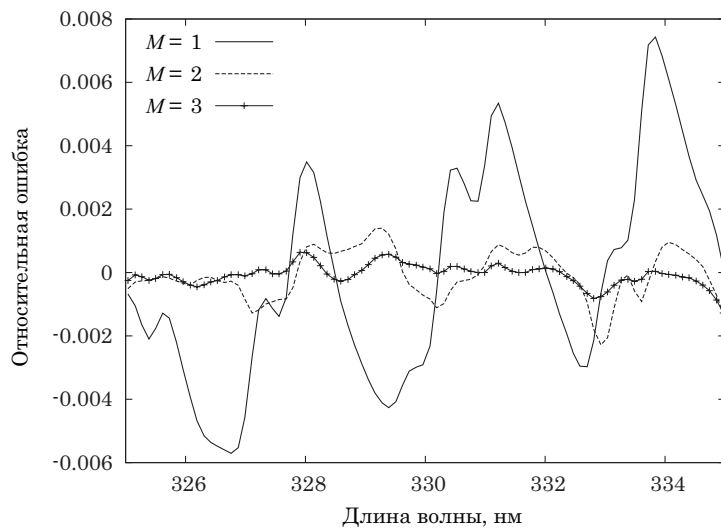


Рисунок 3.6 — Относительная ошибка при расчете матрицы Якоби с помощью метода главных компонент при сохранении $M = 1$, $M = 2$ и $M = 3$ главных компонент — производная по альбедо поверхности.

Таблица 3.1 — Среднеквадратичное отклонение относительной ошибки ε , максимальная относительная ошибка и время счета (CPU) в секундах для методов PCA, LPE, LPP and LEA. Числа в круглых скобках показывают насколько метод PCA быстрее рассмотренного

Метод	$M = 1$	$M = 2$	$M = 3$	$M = 4$
PCA				
СКО(ε)	3.10E-03	4.49E-04	2.39E-04	1.69E-04
max(ε)	3.73E-02	5.73E-03	3.12E-03	1.82E-03
CPU	35.63	42.76	50.09	55.19
LPE				
СКО(ε)	2.77E-03	2.83E-04	2.23E-04	1.53E-04
max(ε)	3.16E-02	3.72E-03	3.07E-03	1.74E-03
CPU	35.77	43.67 (1.02)	52.58 (1.05)	58.38 (1.06)
LPP				
СКО(ε)	2.68E-03	2.37E-04	1.11E-04	3.83E-05
max(ε)	3.13E-02	3.46E-03	2.02E-03	4.72E-04
CPU	37.36 (1.04)	44.98 (1.05)	53.50 (1.07)	59.45 (1.08)
LEA				
СКО(ε)	3.02E-03	3.48E-04	1.20E-04	5.45E-05
max(ε)	3.35E-02	4.91E-03	2.08E-03	4.82E-04
CPU	36.16 (1.02)	43.78 (1.03)	53.19 (1.06)	58.86 (1.07)

3.6.3 Точность и время счета дискретно-ортогональных преобразований

Результаты расчета с применением дискретно-ортогональных преобразований приведены в таблице 3.2. Так как зависимость коэффициента рассеяния от длины волны почти линейная на выбранном интервале, то положим $M_2 = 1$. Алгоритм DWT использует вейвлеты Добеши D12. Для осуществления быстрого вейвлет-преобразования число слоев должно быть равно степени 2. Поэтому для расчетов с использованием дискретного вейвлет-преобразования мы использовали $L = 16$ слоев. Также можно доопределить массив $\mathbf{x}_w^{(p)}$ до длины степени 2. Численный анализ позволяет сделать основные выводы:

1. Дискретно-ортогональные преобразования менее точные, чем методы локального линейного вложения, хотя различие между ними не велико. Например, точность дискретного вейвлет-преобразования такая же, как точность метода главных компонент.
2. Дискретно-ортогональные преобразования медленные, потому что они требуют дополнительных вызовов многопоточковой и двухпоточковой моделей. В частности, метод дискретного вейвлет-преобразования является самым медленным, так как требует, чтобы

Таблица 3.2 — Среднеквадратичное отклонение относительной ошибки ε , максимальная относительная ошибка и время счета (CPU) в секундах для методов DCT, DLT и DWT. Числа в круглых скобках показывают во сколько раз метод PCA быстрее рассмотренного

Метод	$M_1 = 2$	$M_1 = 3$	$M_1 = 4$
DCT			
СКО(ε)	1.06E-03	4.85E-04	2.94E-04
max(ε)	9.56E-03	5.31E-03	3.54E-03
CPU	49.38 (1.15)	57.75 (1.15)	65.16 (1.18)
DLT			
СКО(ε)	1.09E-03	5.73E-04	4.13E-04
max(ε)	9.91E-03	6.01E-03	4.60E-03
CPU	49.51 (1.16)	57.95 (1.16)	67.08 (1.22)
DWT			
СКО(ε)	3.89E-04	2.84E-04	1.87E-04
max(ε)	5.02E-03	3.24E-03	2.27E-03
CPU	52.41 (1.22)	61.54 (1.23)	71.62 (1.30)

длина массива исходных данных была равна степени 2. Это обстоятельство делает его неудобным для использования на практике. К тому же время счета на 20–30 % больше времени счета методом главных компонент.

3.7 Качественная интерпретация метода

Выражение (3.12) имеет два толкования. Первое – математическое. Каждый вектор \mathbf{x} при данной длине волны это точка в 30-мерном пространстве. При изменении длины волны эта точка будет перемещаться, образуя некоторую кривую. Эта кривая расположена близко к некоторому линейному многообразию, размерность которого меньше размерности исходного пространства. Тот факт, что ошибка расчета не превышает 0.1 % при сохранении двух главных компонент в исходном множестве исходных оптических данных, говорит о том, что эта кривая расположена близко к некоторой двумерной плоскости, координатные оси на которой определяются векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 . На рисунке 3.7а показано трехмерное пространство и кривая, принадлежащая плоскости Ω . Рассмотрим кривую на плоскости Ω (см. рисунок 3.7б). В принципе мы должны решить уравнение переноса для всех точек, лежащих на этой кривой (для белых точек). Эти белые точки являются проекциями исходных точек на плоскость Ω . Вместо этого решение ищется в точках $\bar{\mathbf{x}}$, $\bar{\mathbf{x}} \pm \mathbf{a}_1$ и $\bar{\mathbf{x}} \pm \mathbf{a}_2$, по которым оцениваются первая и вторая производные (см. (3.8) и (3.9), соответственно); откуда с помощью ряда Тейлора

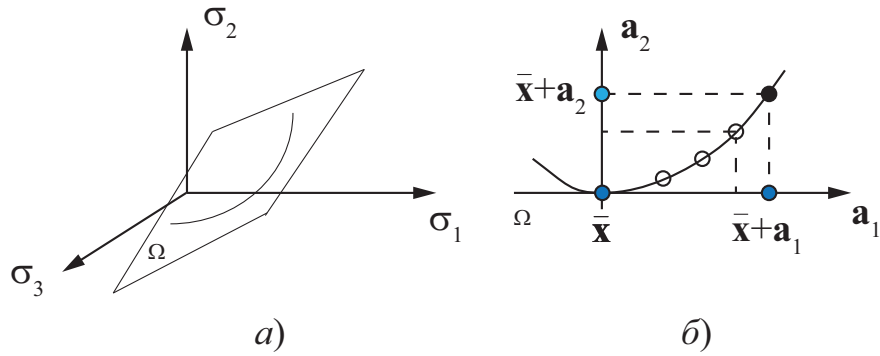


Рисунок 3.7 — Иллюстрация метода снижения размерности. Слева: каждой точке на кривой соответствует набор оптических данных при некоторой длине волны. Кривая расположена близко к объекту меньшей размерности (плоскости). Справа: белыми точками показаны точки, которые соответствуют заданным длинам волн, для которых надо выполнить расчет; \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 — векторы, параллельные координатным осям в новом базисе. Расчет с помощью мультипоточковой модели производится только для синих точек.

(3.7) получаются решения для остальных точек. Если тот же принцип применить в исходном множестве данных, то необходимо было бы оценивать производные вдоль 30 координатных осей, а не двух.

Второе толкование — физическое, хотя и нестрогое, и основано на принципе инвариантности и сложении слоев. Попробуем заменить исходную многослойную среду эквивалентным слоем с эффективными значениями оптической толщины и альбедо однократного рассеяния. Найдем решения при некоторых значениях эффективных оптических параметров, поочередно их варьируя. Для остальных найдем решение из допущения о том, что функция яркости (или в нашем случае корректирующая функция) квадратично зависит от оптических параметров в окрестности $\bar{\mathbf{x}}$. Непосредственная реализация этого метода имела бы смысл, если бы можно было рассчитать эффективные параметры без решения уравнения переноса. Кроме того, явно сохраняется привязка к физическим параметрам (оптической толщине и альбедо однократного рассеяния), что накладывает дополнительные ограничения на метод. Тем не менее, метод снижения размерности исходных данных приводят нас к системе с меньшим числом параметров, что можно условно интерпретировать как уменьшение числа слоев.

3.8 Оптимизация расчета спектра в случае присутствия облака

Как было указано в Главе 1, в приближении независимых пикселей решение задачи о переносе излучения через атмосферу, содержащую слой с облаком с неким параметром

облачности (*cloud fraction*) c , требует двух вызовов солвера уравнения переноса: для случая чистого неба ($c = 0$) и для случая сплошного облака ($c = 1$) (см. уравнение (1.33)). Яркость текущего пикселя тогда рассчитывается как

$$I = (1 - c)I_{\text{clear}} + cI_{\text{cloud}}.$$

При этом облако описывается как однородный слой. Ниже мы рассмотрим два метода ускорения расчета. Оба метода основаны на повторном использовании результатов расчета для чистого неба в расчете с облачным слоем.

Первый метод является численно точным. В нем при решении уравнения переноса для чистого неба сохраняются промежуточные массивы, такие как собственные вектора, для тех слоев, которые не меняются при добавлении облачного слоя. Затем для расчета с облаком они используются вновь. Данный метод удобно использовать вместе с телескопическим методом. Второй метод заключается в расчете спектральной поправки на основе двухпотокового приближения. Он удобен в контексте методов снижения размерности, так как расчет для сценария с облаком требует только дополнительного вызова двухпотокового солвера. Эта идея была применима к уже разработанным кодам, например, LIDORT и DOME, и не требует их модификации. Несмотря на то, что метод является приближенным, максимальная ошибка в расчете спектра менее 0.2 %.

3.8.1 Оптимизация расчета с помощью сохранения массивов для случая ясного неба

Для дальнейших рассуждений нам потребуются следующие выводы из части 2.2.4:

- решение уравнения переноса методом дискретных ординат сводится к задаче на собственные значения от матрицы слоя. Её спектральная декомпозиция определяется только параметрами текущего слоя и не зависит от остальных слоев;
- итоговое выражение для дискретизованного уравнения для плоского слоя имеет матричную форму; оно связывает яркости на границах слоя (см. уравнение (2.114)):

$$\mathfrak{A}_{mj}^1 \mathbf{i}_{mj} + \mathfrak{A}_{mj}^2 \mathbf{i}_{mj+1} = \mathbf{b}_{mj};$$

- матрицы \mathfrak{A}_{mj}^1 и \mathfrak{A}_{mj}^2 определяются только параметрами слоя j ; вектор \mathbf{b}_{mj} зависит от параметров слоя j , а также от параметров вышележащих слоев; для диффузионной

части решения

$$\mathbf{b}_{mj} \sim \exp \left(- \sum_{k=1}^{j-1} \Delta \tau_k \right); \quad (3.19)$$

- перегруппировав элементы матриц \mathfrak{A}_{mj}^1 и \mathfrak{A}_{mj}^2 , уравнение (2.114) можно переписать через матрицы отражения и пропускания (см. уравнение (2.119)):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{i}_{mj}^+ \\ \mathbf{i}_{mj+1}^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{mj}^+ & \mathbf{T}_{mj}^+ \\ \mathbf{T}_{mj}^- & \mathbf{R}_{mj}^- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{i}_{mj}^- \\ \mathbf{i}_{mj+1}^+ \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \Sigma_{mj}^+ \\ \Sigma_{mj}^- \end{bmatrix},$$

матрицы \mathbf{R}_{mj}^\pm и \mathbf{T}_{mj}^\pm зависят только от параметров слоя j , для Σ_{mj}^\pm справедливо соотношение, аналогичное (3.19).

Ключевая идея оптимизации заключается в том, что включение слоя с облаком не изменяет оптические свойства остальных слоев. Рассмотрим добавление облачного слоя в систему, как показано на рисунке 3.8. В простейшем случае облако с оптической толщиной $\Delta \tau$ занимает слой j_0 с исходной оптической толщиной $\Delta \tau_0$ (см. рисунок 3.8б). В этом случае, решая задачу для ясного неба, мы сохраняем матрицы \mathfrak{A}_{mj}^1 и \mathfrak{A}_{mj}^2 для всех слоев $j \neq j_0$ и вектор-источник \mathbf{b}_{mj} для всех слоев $j \neq j_0$. Затем, решая уравнение переноса для системы с облаком, мы используем сохраненные матрицы для формирования уравнения слоя (2.114) для слоев $j < j_0$; а для слоев под облаком ($j > j_0$), учитывая 3.19, мы делаем поправку для \mathbf{b}_{mj} :

$$\mathbf{b}_{mj}^{\text{cor}} = \mathbf{b}_{mj} \exp (\Delta \tau_0 - \Delta \tau). \quad (3.20)$$

Аналогичную коррекцию надо сделать при учете нижнего граничного условия:

$$\mathbf{r}_m^{\text{cor}} = \mathbf{r}_m \exp (\Delta \tau_0 - \Delta \tau). \quad (3.21)$$

Если облако «разрезает» исходный слой (рисунок 3.8в), то описанная процедура применяется для «нетронутых» слоев. Для «урезанных» слоев имеет смысл сохранить собственные вектора и значения матрицы слоя, так как они не зависят от оптической толщины слоя.

В случае решения граничной задачи для многослойной системы матрично-операторным методом слои объединяются в стек с эффективными параметрами. Предположим, что облако находится в слое j_0 , как показано на рисунке 3.9. Тогда оптимизация осуществляется следующим образом:

- сохраняется стек 1 со слоями над облаком ($j = 1, \dots, j_0 - 1$);



Рисунок 3.8 — Расположение облака относительно слоев «чистого неба».

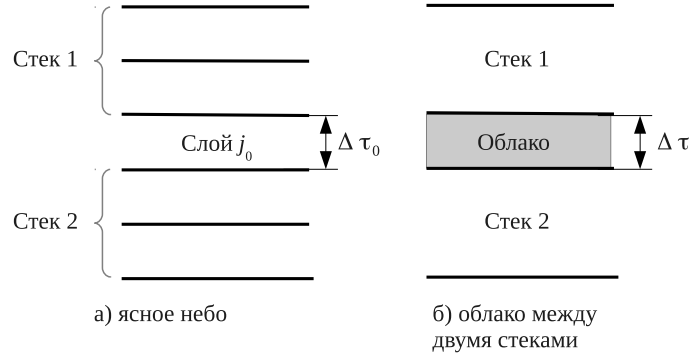


Рисунок 3.9 — Расположение облака между двумя стеклами слоев.

- сохраняется стек 2 со слоями под облаком ($j = j_0 + 1, \dots, N$);
- как и в (3.19), делается поправка функции-источника для стека 2

$$\Sigma_m^{\pm \text{cor}} = \Sigma_m^{\pm} \exp(\Delta\tau_0 - \Delta\tau).$$

Тогда для атмосферы с облаком мы должны получить матричное уравнение вида (2.119) для слоя с облаком, затем два раза применить метод сложения слоев согласно соотношениям (2.120) и (2.121) для системы из трех слоев: стек 1, слой с облаком и стек 2 (см. рисунок 3.9б).

Если облако разрезает исходные слои, то матрицы \mathbf{R}_{mj}^{\pm} и \mathbf{T}_{mj}^{\pm} для «урезанных» слоев будут изменены. Для необходимой поправки не существует простого аналитического выражения. Поэтому для этих слоев имеет смысл сохранить спектральную декомпозицию матрицы слоя.

Отметим, что описанный метод имеет смысл только для первых трех азимутальных гармоник, участвующих в расчете для атмосферы без облака (остальные гармоники в случае

безоблачного неба равны нулю). Расчет гармоник $m > 2$ для атмосферы с облаком осуществляется с помощью телескопического метода.

3.8.2 Ускорение расчета с облаком с помощью спектральной коррекции

Далее рассмотрим метод оптимизации расчета с облачным слоем, который не требует изменения внутренней структуры алгоритма решения уравнения переноса. В его основе лежит та же идея, что и в моделях переноса с методами снижения размерности, а именно: разница между точным спектром и решением в двухпотоковом приближении может быть описана полиномом малой степени. Поэтому можно было ввести корректирующую функцию для двухпотокового приближения, существенно повысив его точность:

$$I(\lambda) = I^{\text{TS}}(\lambda) f(\lambda), \quad (3.22)$$

здесь индекс «TS» обозначает «двухпотоковое приближение» (от two stream).

В ряде случаев двухпотоковое решение имеет схожую спектральную структуру. Тогда относительная разница между решениями с облачным слоем и без него изменится несильно при переходе от мультипотоковой модели к двухпотоковой модели, что математически формулируется как

$$\frac{I_{\text{cloud}}(\lambda)}{I_{\text{clear}}(\lambda)} \sim \frac{I_{\text{cloud}}^{\text{TS}}(\lambda)}{I_{\text{clear}}^{\text{TS}}(\lambda)}.$$

Иначе это выражение можно представить следующим образом:

$$I_{\text{cloud}}(\lambda) = I_{\text{clear}}(\lambda) \frac{I_{\text{cloud}}^{\text{TS}}(\lambda)}{I_{\text{clear}}^{\text{TS}}(\lambda)} K(\lambda), \quad (3.23)$$

где $I_{\text{cloud}}^{\text{TS}}(\lambda)$ – решение в двухпотоковом приближении для атмосферы с облаком, $I_{\text{clear}}^{\text{TS}}(\lambda)$ – решение в двухпотоковом приближении для атмосферы без облака, $K(\lambda)$ – корректирующая функция. Далее, применяя метод снижения размерности для расчета многопотокового решения для атмосферы без облака, т.е. $I_{\text{clear}}(\lambda) \approx I_{\text{clear}}^{\text{TS}}(\lambda) f(\lambda)$, уравнение (3.23) принимает вид:

$$I_{\text{cloud}}(\lambda) = I_{\text{clear}}^{\text{TS}}(\lambda) f(\lambda) \frac{I_{\text{cloud}}^{\text{TS}}(\lambda)}{I_{\text{clear}}^{\text{TS}}(\lambda)} K(\lambda) = I_{\text{cloud}}^{\text{TS}}(\lambda) f(\lambda) K(\lambda) \quad (3.24)$$

Таблица 3.3 — Времена счета и относительное ускорение с помощью сохранения промежуточных массивов. «МОМ» обозначает «матрично-операторный метод», «ГМ» обозначает «метод глобальной матрицы». Через дробь указаны времена счета оптимизированного алгоритма

M_{rank}	МОМ, с.	Относительное ускорение	Глобальная матрица, с.	Относительное ускорение
5	24/14	92%	21/11	95%
8	26/15	86%	22/12	91%

Таким образом, вычисление мультипоточкового решения для атмосферы с облаком сводится к расчету в двухпоточковом приближении для каждой спектральной точки.

Корректирующая функция $K(\lambda)$ вычисляется заранее для различных значений параметров облачного слоя с помощью уравнения (3.23):

$$K(\lambda) = \frac{I_{\text{cloud}}(\lambda)}{I_{\text{clear}}(\lambda)} \frac{I_{\text{clear}}^{\text{TS}}(\lambda)}{I_{\text{cloudy}}^{\text{TS}}(\lambda)}, \quad (3.25)$$

и аппроксимируется линейной функцией (точность аппроксимации рассмотрена в следующей секции):

$$K(\lambda) \approx k(\lambda - \bar{\lambda}) + b, \quad (3.26)$$

где k и b — константы, значения которых хранятся в заранее посчитанных таблицах, $\bar{\lambda}$ — среднее значение длины волны в спектральном интервале (в нашем случае $\bar{\lambda} = 330$ нм). Подставляя (3.26) в (3.23), получим:

$$I_{\text{cloud}}(\lambda) \approx I_{\text{clear}}(\lambda) \frac{I_{\text{cloud}}^{\text{TS}}(\lambda)}{I_{\text{clear}}^{\text{TS}}(\lambda)} [k(\lambda - \bar{\lambda}) + b]. \quad (3.27)$$

3.8.3 Численные расчеты

Проанализируем описанные методы оптимизации с точки зрения скорости расчета и точности на примере модели атмосферы, описанной в пункте 2.2.5.

Первый метод оптимизации был реализован в контексте матрично-операторного метода и метода глобальной матрицы. Расчет осуществлялся с 16 дискретными ординатами в полусфере. Верхняя граница облака $h_{\text{top}} = 5$ км, геометрическая толщина облака $\Delta h = 1$ км, оптическая толщина облака $\Delta \tau = 1$. Решение в надир определялось с помощью метода интегрирования источника. Для выполнения условия сходимости Коши (2.122) потребова-

Таблица 3.4 — Исходные параметры облака и ошибка аппроксимации (3.23). В круглых скобках приведены ошибки нелинейной аппроксимации (3.28)

№	h_{top} , км	Δh , км	$\Delta \tau$	Тип облака	Средняя ошибка, %	Макс. ошибка, %
1	4	2	1	Cum. clean	0.01	0.04
2	3	1	1	Cum. clean	0.01	0.02
3	3	1	5	Cum. clean	0.05	0.2
4	3	1	5	Cum. polluted	0.2	0.1
5	9	1	20	Cum. clean	0.1	0.2
6	20	15	10	HG $g = 0.9$	0.5(0.22)	1.4(0.7)
7	30	20	20	HG $g = 0.9$	0.6(0.22)	1.4(0.6)
8	40	30	30	HG $g = 0.9$	0.6(0.22)	1.6(0.71)

лось $M_{\text{rank}} = 5$ азимутальных гармоник для $\varepsilon_{\text{az}} = 10^{-4}$ и $M_{\text{rank}} = 8$ азимутальных гармоник для $\varepsilon_{\text{az}} = 10^{-6}$. При решении для системы с облачным слоем для азимутальных гармоник $m > 2$ использовался телескопический метод. Времена счета, а также полученное ускорение приведены в таблице 3.3. Расчеты выполнены на компьютере Intel Xeon E5-1620 3.60 GHz с операционной системой OpenSUSE 12.2. Метод сохранения промежуточных массивов приводит почти к двукратному ускорения расчета.

Для исследования точности приближения (3.27) были проведены расчеты для разных значений верхней границы облака h_{top} , геометрической толщины облака Δh и оптической толщины облака $\Delta \tau$. Параметры тестовых примеров приведены в таблице 3.4. Для облаков в первых 5 примерах параметры распределения по размерам частиц взяты из базы данных ОРАС [39]. Индикатрисы рассеяния рассчитаны с помощью теории Mie. Для тестов 6–8 используется индикатриса Хенли-Гринштейна [288] с параметром асимметрии $g = 0.9$. Во всех случаях альbedo однократного рассеяния в слое с облаком варьируется от 0.8 до 0.99. Общее содержание озона 450 DU².

На рисунке 3.10 показаны спектры, рассчитанные в двухпотоковой и мультипотоковой моделях для атмосферы с облаком и без него для теста №1. Корректирующая функция $K(\lambda)$ показана на рисунке 3.11. Результаты, соответствующие тесту №5, показаны на рисунках 3.12 и 3.13.

Так как мультипотоковые и двухпотоковые решения имеют схожую форму спектров, корректирующая функция $K(\lambda)$ близка к линейной функции, хотя, строго говоря, $K(\lambda)$ имеет немонотонную зависимость от длины волны. Для тестов №1–5 ошибка линейной аппроксимации (3.26) составляет 0.1–0.2 %. Тесты №6–8 характеризуются большими значениями h_{top} , Δh , $\Delta \tau$ и g . Как следствие, влияние слоя облака на спектр оказывается сильным

²Добсоновская единица соответствует 0.001 атм·см.

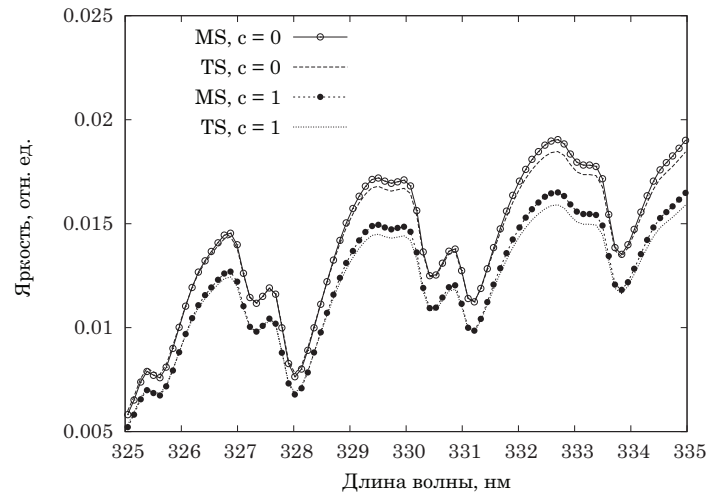


Рисунок 3.10 — Спектры, рассчитанные для теста №1 из таблицы 3.4 в двухпотоковой и мультипотоковой моделях для атмосферы с облаком и без него. Случай $c = 0$ соответствует ясному небу, $c = 1$ соответствует атмосфере со сплошным облачным слоем.

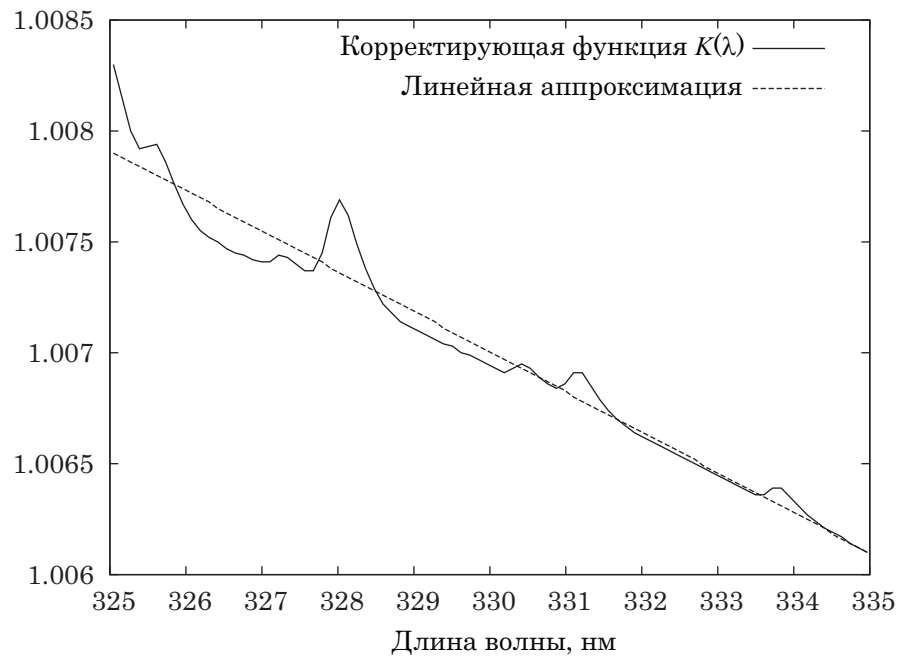


Рисунок 3.11 — Корректирующая функция $K(\lambda)$ и его линейная аппроксимация для теста №1 из таблицы 3.4.

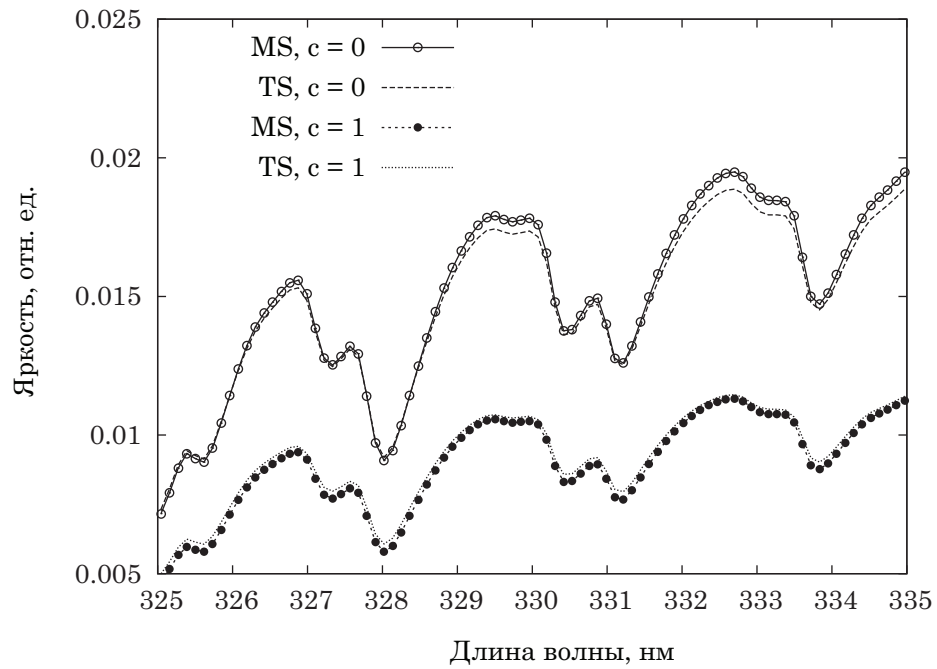


Рисунок 3.12 — Спектры, рассчитанные для теста №5 из таблицы 3.4 в двухпотоковой и мультипотоковой моделях для атмосферы с облаком и без него. Случай $c = 0$ соответствует ясному небу, $c = 1$ соответствует атмосфере со сплошным облачным слоем.

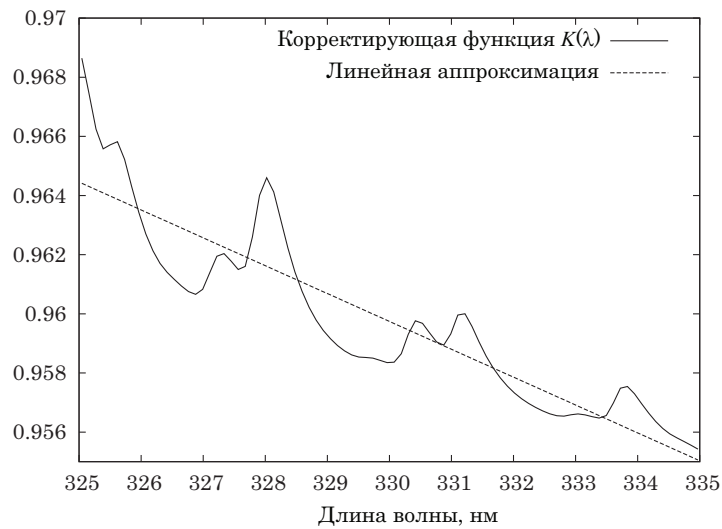


Рисунок 3.13 — Корректирующая функция $K(\lambda)$ и его линейная аппроксимация (3.26) для теста №5 из таблицы 3.4.

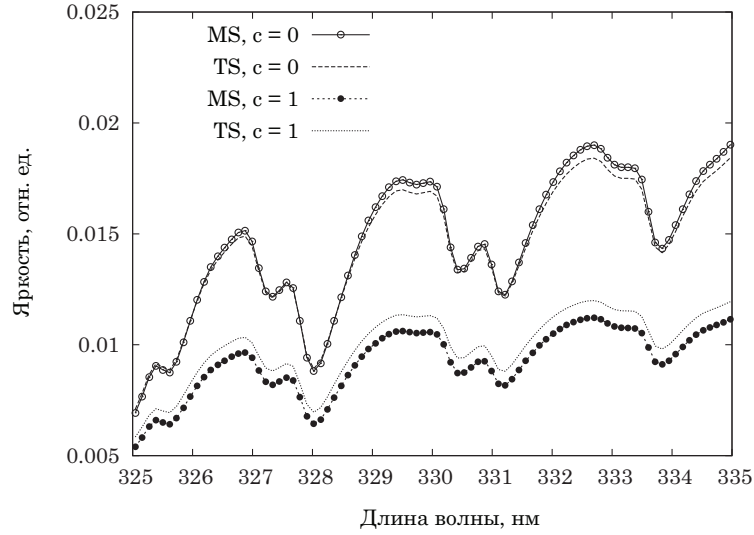


Рисунок 3.14 — Спектры, рассчитанные для теста №6 из таблицы 3.4 в двухпотоковой и мультипотоковой моделях для атмосферы с облаком и без него. Случай $c = 0$ соответствует ясному небу, $c = 1$ соответствует атмосфере со сплошным облачным слоем.

и $K(\lambda)$ имеет ярко выраженную немонотонную зависимость. Максимальная ошибка линейной аппроксимации составляет 1.5 % при средней ошибке 0.5%. Для того, чтобы улучшить аппроксимацию и точнее воспроизвести квазипериодическую структуру $K(\lambda)$, заметим, что форма $K(\lambda)$ напоминает форму сечения поглощения озона (см. рисунок 1.5). Улучшенная аппроксимация имеет вид:

$$K(\lambda) \approx k(\lambda - \bar{\lambda}) + b + v\sigma_{\text{O}_3}(\lambda), \quad (3.28)$$

где $\sigma_{\text{O}_3}(\lambda)$ – зависимость сечения поглощения озона от длины волны при температуре 270 K, v – подгоночный параметр. Сечение поглощения взято из [26]. Также была сделана свертка сечения с аппаратной функцией инструмента GOME на 88 точках в интервале 325–335 нм. Ошибки нелинейной аппроксимации показаны в таблице 3.4: максимальная ошибка составляет 0.2 % при средней ошибке 0.03 %. На рисунках 3.14 и 3.16 показаны расчетные спектры для тестов №6 и №8, соответственно. На рисунках 3.15 и 3.17 показаны линейная и нелинейная аппроксимации для указанных случаев.

Говоря о построении линеаризованной модели для определения концентрации озона, следует отметить, что она будет включать расчет производной $K(\lambda)$ по концентрации озона. Расчеты не обнаружили сильной зависимости вида $K(\lambda)$ от общего количества озона в диапазоне 300–500 DU. Поэтому этой производной можно пренебречь по сравнению с остальными производными. В общем же случае расчеты $K(\lambda)$ должны быть выполнены для разных

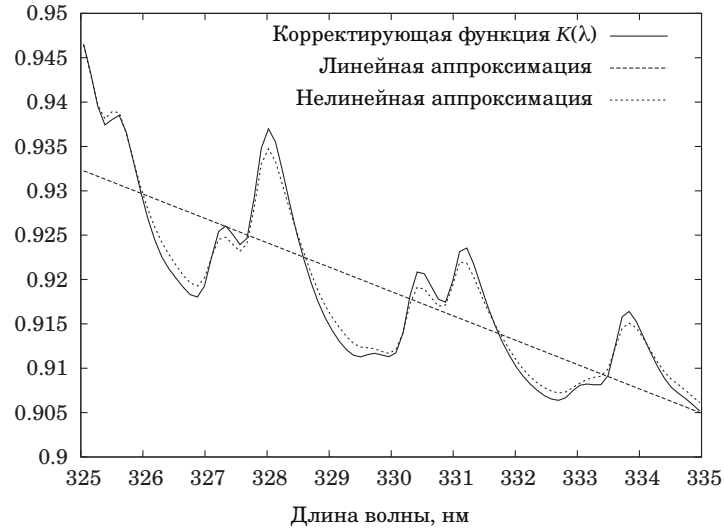


Рисунок 3.15 — Корректирующая функция $K(\lambda)$ для теста №6 из таблицы 3.4, его линейная (3.26) и нелинейная (3.28) аппроксимации.

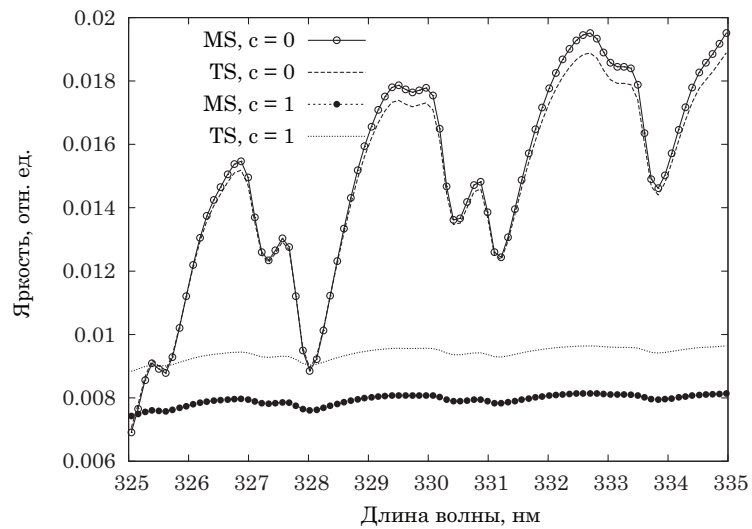


Рисунок 3.16 — Спектры, рассчитанные для теста №8 из таблицы 3.4 в двухпотоковой и мультипотоковой моделях для атмосферы с облаком и без него. Случай $c = 0$ соответствует ясному небу, $c = 1$ соответствует атмосфере со сплошным облачным слоем.

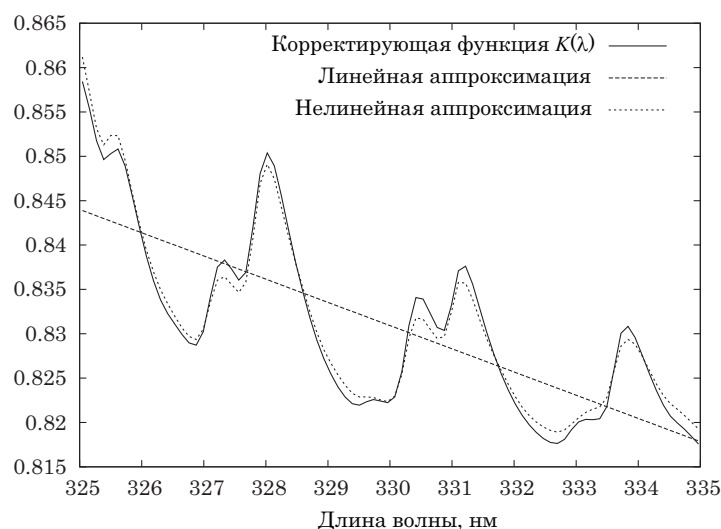


Рисунок 3.17 — Корректирующая функция $K(\lambda)$ для теста №8 из таблицы 3.4, его линейная (3.26) и нелинейная (3.28) аппроксимации.

значений количества озона, а соответствующая производная может быть оценена с помощью конечных разностей.

3.9 Влияние аппаратно-программных средств на скорость решения уравнения переноса излучения для плоской геометрии среды

3.9.1 Обзор методов распараллеливания вычислений

Для ускорения расчета интенсивно используются технологии распараллеливания. Одним из самых простых способов распараллелить вычисления на несколько процессоров является программный интерфейс OpenMP [289]. С помощью специальных директив компилятора можно легко распараллелить цикл "for". OpenMP совместим с C, C++ и FORTRAN. OpenMP-директивы могут быть восприняты компилятором как обычные комментарии, что позволяет использовать один и тот же код для последовательных и параллельных вычислений. К достоинствам такого подхода относится еще и то, что сам расчетный код остается практически неизменным, что облегчает его поддержку. Получаемое ускорение зависит от требований приложения к памяти, пропускной способности памяти и числа доступных процессоров. Обычно ожидается 70-80 % от теоретического N -кратного ускорения на машине с N CPU в случае, если код можно полностью распараллелить. Благодаря простоте в ис-

пользовании интерфейс OpenMP используется во многих радиационных кодах, таких как LIDORT [54] и SCIATRAN [160], для распараллеливания цикла по длинам волн.

Радиационные коды, основанные на методе дискретных ординат, можно распараллелить также на уровне матричных операций. К примеру, Math Kernel Library (MKL) [290] является распараллеленной версией библиотеки LAPACK [291]. В [75] с помощью MKL было получено двукратное ускорение на двухъядерном процессоре. Как правило, совместимость кода, использующего LAPACK, с MKL высокая. Разработчику следует лишь указать путь к MKL на стадии сборки программы. Соответствующие возможности предусмотрены в makefile кода PSTAR [63, 235]. Также в состав MKL входит библиотека векторных операций VML, позволяющая обрабатывать массив с помощью нескольких потоков выполнения. Эффективность MKL на процессорах Intel столь высока, что популярные математические пакеты, такие как MATLAB и MAPLE, используют MKL, выполняя функцию оболочки библиотеки. В этом контексте нельзя не отметить SCALAPACK [292] – версию LAPACK, поддерживающую параллельные вычисления.

Удобным способом осуществления параллельных вычислений является MPI [293–295] – программный интерфейс для передачи информации между расчетными ядрами. MPI имеет несколько реализаций под разные платформы и с разными условиями распространения. Однако все реализации имеют следующие функции:

- определение номера текущего процесса (MPI_COMM_RANK)
- определение общего количества процессов (MPI_COMM_SIZE)
- блокирующие и неблокирующие операции рассылки и сбора данных (MPI_(I)SEND, MPI_(I)Recv)
- барьер (MPI_Barrier)

В случае плоской задачи технологию MPI можно применить, например, для распараллеливания вычислений по азимутальным гармоникам. Однако, такой путь не является удобным, так как приоритетная задача MPI – организация обмена данными между процессами. В случае многомерных задач расчетная область делится на подобласти, каждую из которых обрабатывает одно ядро процессора, а передача данных между ними осуществляется с помощью MPI. Трехмерный радиационный код SHDOM [226] позволяет обсчитывать область несколькими процессами, причем для передачи данных между ними используется MPI.

Изначально разработанные для обработки компьютерной графики видеокарты (Graphics Processing Unit – GPU) используются для решения задач компьютерной томогра-

фии [296, 297] и гидродинамики [298–300]. Основное преимущество GPU заключается в большом количестве расчетных ядер по сравнению с традиционными CPU. Например, NVIDIA карта Tesla K20c имеет 2496 ядер. Для организации параллельных вычислений на графических процессорах необходим соответствующий интерфейс. Наиболее популярным интерфейсом является Compute Unified Device Architecture (CUDA)³ [301]. CUDA предоставляет разработчику инструменты для передачи данных между CPU и GPU. Специальный компилятор *nvc* позволяет создавать бинарные файлы, исполнимые для GPU. Примерами альтернативных интерфейсов являются OpenCL, который позволяет создавать платформ-независимые приложения (один и тот же код может быть выполнен на CPU и GPU) и OpenACC, который организует расчет с помощью специальных директив компилятора, по аналогии с OpenMP.

GPU хорошо зарекомендовали себя для выполнения операций с матрицами большого размера. Однако получаемое с помощью GPU ускорение при одинаковой архитектуре может отличаться на несколько порядков для различных задач. Например, в [302] авторы получили ускорение 3000 для расчета спектра в инфракрасной области. В [303] получено ускорение 90 раз, а в [304] авторы получили ускорение 10 раз. Для матриц малого размера вычисления на GPU не приводят к существенному ускорению. В [305] описана адаптированная версия LAPACK для GPU (CULA), а также проведено сравнение между CULA и MKL. Согласно проведенным тестам [306], CULA всего в 2-5 раз быстрее MKL для матриц 8000×8000 , в то время как для матриц $N \times N$, $N < 512$, производительности вычислений на CPU и GPU сопоставимы. В [307] получено ускорение 10–30 раз в зависимости от типа матричных операций и реализации. В [308] получено ускорение не более 6 раз для матричных операций (например, 4 раза для произведения матриц) после оптимизации кодов для CPU и GPU.

3.9.2 Реализация алгоритма расчета спектра

Алгоритм расчета спектров излучения, измеренного спутниками, включает несколько циклов. Они показаны в псевдокоде для метода глобальной матрицы:

```

1 // loop over pixels
2 for(i_pixel=0; i_pixel<n_pixel; i_pixel++){
3     // loop over wavelengths
4     for(i_wl=0; i_wl<n_wl; i_wl++){
5         compute_Gaussian_quadratures();
6         m=-1;
7         // loop over azimuthal harmonics
8         while(check_convergence()!=1){

```

³<https://developer.nvidia.com/category/zone/cuda-zone>

```

9      m++;
10     compute_Legendre_polynomials(<geomety parameters>);
11     // loop over layers
12     for(i_layer=0;i_layer<N_layer;i_layer++){
13         Make_layer_matrix(<parameters of layer i_layer>);
14         Singular_value_decomposition(<layer matrix>);
15         Get_entries_of_layer_equation(<eigenvalues and
16             eigenvectros of the layer matrix>);
17         Esseble_them_to_global_system();
18     }
19     Solve_global_system();
20 }

```

Для матрично-операторного метода соответствующий псевдокод имеет вид:

```

1  // loop over pixels
2  for(i_pixel=0;i_pixel<n_pixel;i_pixel++){
3      // loop over wavelengths
4      for(i_wl=0;i_wl<n_wl;i_wl++){
5          compute_Gaussian_quadratures();
6          m=-1;
7          // loop over azimuthal harmonics
8          while(check_convergence()!=1){
9              m++;
10             Legendre_polynomials(<geomety parameters>);
11             // loop over layers
12             for(i_layer=0;i_layer<N_layer;i_layer++){
13                 Make_layer_matrix(<parameters of layer i_layer>);
14                 Singular_value_decomposition(<layer matrix>);
15                 //get reflection and transmission matrises
16                 MOM(<eigenvalues and eigenvectors of the layer matrix
17                     >);
18                 if(i_layer!=0) add_layer_stack();
19             }
20         }
21     }

```

В [88] была предложена следующая оптимизация: для различных углов падения пересчитывается только функция источников, а яркости для нескольких углов падения вычисляются на при пост-обработке с помощью метода интегрирования функции источников. Таким образом, даже при расчете углового распределения солвер вызывается фактически только один раз. Следовательно, сам солвер уравнения переноса вложен в тела двух циклов: по пикселям и по длинам волн.

Методы снижения размерности, описанные ранее, используют процедуру вычисления собственных векторов и значений ковариационной матрицы, а реализация метода дискретных ординат основана на стандартных матричных операциях: перемножение матриц, LU -декомпозиция и нахождение собственных векторов и значений. Соответствующие процедуры содержатся в библиотеке LAPACK: ?GEMM, ?GETRF и ?GEEV, соответственно, где

знак «?» следует заменить на «s» для расчетов с одинарной точностью и «d» для расчетов с двойной точностью. В некоторых DISORT-подобных кодах для нахождения собственных векторов и значений матрицы слоя используется солвер ASYMTX, оптимизированный для случая, когда все собственные значения являются действительными числами.

Метод дискретных ординат с методами ускорения, описанными выше, был запрограммирован на языке C++. Для того, чтобы сохранить совместимость с C-версией LAPACK (CLAPACK)⁴, при написании кода следует придерживаться нескольких правил. Имена подпрограмм LAPACK совпадают с именами в FORTRAN, но записываются в низком регистре. Кроме того, в начало имени добавляется знак подчеркивания «_». С помощью команды «typedef» вводятся типы данных, аналогичные тем, что используются в FORTRAN. Все параметры подпрограмм передаются по ссылке. Данные в массивах хранятся по столбам (как в FORTRAN). Технология пересылки данных из памяти CPU в память GPU и обратно требует, чтобы данные в многомерных массивах располагались в памяти непрерывно. Заметим, что "классическое" объявление двумерного массива в C (например, `double A[N][N]`) не соответствует этому требованию. Чтобы выполнить это требование и сохранить читабельность кода, были использованы макросы для двумерных и трехмерных массивов:

```
1 #define INDEX(i,j,ld) (((j)*(ld))+(i))
2 #define INDEX3D(i,j,k,ld1,ld2) (((k)*(ld1)*(ld2))+((j)*(ld1))
   +(i))
```

где `ld` обозначает “*leading dimension*”. Ниже показан пример инициализации двумерного массива через макросы:

```
1 #define N 64
2 double *A;
3 A = new double [N*N];
4 for(int j=0; j<N; j++)
5     for(int i=0; i<N; i++)
6         A[INDEX(i,j,N)] = 0.0;
7 delete [] A;
```

Заметим, что цикл организован по столбцам (как в FORTRAN, а не в C).

Код, выполняемый на GPU, не должен вызывать сторонние библиотеки, выполняемые на CPU. Поэтому код разработан был таким образом, чтобы все необходимые подпрограммы были в него уже включены. Подпрограмма для нахождения собственных векторов и значений (subroutine `c_asymmetric_matrix`) была взята из пакета `cdisort2.1.3` (by Tim Dowling)⁵ [309]. Процедуры для *LU*-декомпозиции и инверсии матриц были написаны заново, а процедура перемножения матриц взята из CLAPACK. Были разработаны две версии: для одинарной

⁴Библиотека доступна по адресу <http://www.netlib.org/clapack/>.

⁵<http://www.libradtran.org/bin/cdisort-2.1.3.tar.gz>

точности и для двойной точности. Обе версии сравнены с кодом DISORT. Разница не больше 0.005 % при расчете с двойной точностью и не больше 0.2 % при расчете с одинарной точностью для модели атмосферы, используемой при восстановлении озона в ультрафиолетовой области. Также на основе описания из [287] была разработана двухпоточковая версия метода дискретных ординат. И мультипоточковый код, и двухпоточковый код интегрированы в алгоритм, использующий методы снижения размерности.

3.9.3 Обзор архитектуры GPU и технологии CUDA

Далее мы рассмотрим основные принципы программирования под GPU, важные для дальнейшего обсуждения результатов. Подробные обзоры можно найти в руководстве [310–312], а также во множестве работ [303, 304, 313–315], посвященных использованию CUDA в решении прикладных задач.

3.9.3.1 Иерархия памяти и потоков выполнения (threads)

Важным аспектом с точки зрения скорости счета кода является управление памятью. Разработка кода должна проводиться с учетом архитектуры памяти GPU. Графические карты имеют несколько типов памяти:

- *registers*: самая быстрая память GPU. Обращение к ней осуществляется за 2-4 такта видеокарты. Однако её размер чрезвычайно мал: в карте Tesla K20c 65536 4-байтовых регистра на один мультипроцессор.
- *shared memory*: память, доступ к которой имеют threads в рамках одного блока. Она медленнее регистров, однако все равно достаточно быстрая. Размер *shared memory* ограничен 48 кбайт на один мультипроцессор.
- *global memory*: глобальная память видеокарты. Имеет большой объем (несколько гигабайт на современных картах), однако время доступа к ней крайне мало (700 тактов видеочипа), что зачастую делает непригодным на практике вычисления в глобальной памяти, сводя все преимущества GPU-параллельных вычислений к нулю.
- *constant memory*: по сути та же глобальная память с той лишь разницей, что значение переменной, считываемой из константной памяти кэшируется, так что последующее обращение к переменной осуществляется быстрее. Однако на видеокартах с compute capability не ниже 3.5 кэшируются также данные и из глобальной памяти. Поэтому необходимость в константной памяти фактически отпала.

GPU имеет несколько мультипроцессоров. Каждый мультипроцессор имеет несколько арифметическо-логических устройств (ALU) с регистрами и shared memory. Каждое ALU имеет физический доступ к shared memory в рамках одного мультипроцессора. Каждый поток выполнения может осуществлять чтение и запись в глобальной памяти. Потоки выполнения организованы в группы, называемые warps. Каждая такая группа потоков выполняется в стиле SIMD (single instruction multiple data), то есть в каждый момент времени все потоки из одной группы выполняют одну и ту же инструкцию.

CUDA-программа имеет две части. Одна часть выполняется на CPU, другая, называемая ядром (kernel), на GPU. Kernels вызываются из CPU-кода и выполняются большим числом потоков. В контексте гетерогенных CPU/GPU вычислений CPU называется хостом (host), а GPU – устройством (device).

Каждый поток выполнения «знает» свой номер (ID) и номер блока, к которому принадлежит, через структуры threadIdx и blockIdx, определенные в CUDA. В принципе эти структуры имеют несколько полей (threadIdx - x,y,z и blockIdx - x,y), что позволяет организовать трехмерную нумерацию потоков и двухмерную нумерацию блоков. Так как по смыслу массив измерений, которые надо обработать, образует одномерную структуру, мы используем одномерную индексацию потоков выполнения. По известному номеру блока и потока в этом блоке можно получить уникальный номер во множестве всех потоков:

```
1 int threadID = blockIdx.x*blockDim.x+threadIdx.x;
```

где blockDim.x – число потоков в блоке.

В программе есть три этапа: передача данных из памяти CPU в глобальную память GPU, выполнение расчета на GPU, и, наконец, передача данных из памяти GPU в память CPU. В CUDA функции подразделяются на три категории:

- `__global__` – функция вызывается из CPU и выполняется на GPU.
- `__device__` – функция вызывается и выполняется на GPU.
- `__host__` – функция вызывается и выполняется на CPU (такими считаются все функции по умолчанию, если не указано иное).

Важным аспектом для проектирования кода является то, что `__device__` функции не могут вызывать `__host__` функции и наоборот.

3.9.3.2 Асинхронная передача данных

Память GPU соединена с памятью CPU через шину PCI Express, чья пропускная способность меньше, чем пропускная способность памяти GPU. Это обстоятельство приводит к тому, что обмен данными между CPU и GPU замедляет работу программы в целом. Для того, чтобы ускорить работу, выгодно перекрывать передачу данных и их обработку (*hiding latency using concurrency*). Такое перекрытие (*overlapping*) осуществляется с помощью потоков CUDA (CUDA streams). CUDA-поток это набор операций, которые последовательно выполняются на GPU. Операции из разных потоков могут перекрываться и выполняться одновременно, если позволяет устройство.

Стратегия асинхронной передачи данных такова: массив данных разбивается на порции, каждая порция передается из CPU в GPU асинхронно и обрабатывается независимым CUDA-поток. Обработка данных может начаться, когда первая порция данных оказалась в памяти GPU, не дожидаясь пересылки всего массива данных. Для организации асинхронного копирования необходимо, чтобы адреса данных в памяти CPU и GPU не менялись в процессе расчета и пересылки⁶. На GPU это по умолчанию гарантируется. На CPU обычно массивы находятся в виртуальном адресном пространстве и GPU не имеет прямого доступа к массивам. Для решения этой проблемы в CUDA предусмотрена возможность выделять особую область памяти (*pinned memory*), такую что операционная система не имеет возможности переместить её по своему усмотрению. Передача данных с host на видеокарту осуществляется без участия операционной системы посредством DMA (*direct memory access*).

3.9.3.3 Перекрытие CPU/GPU расчетов

С точки зрения CPU вызов `cuda kernel` не является блокирующим, т.е. CPU может выполнять другие вычисления, пока идет расчет на GPU и не потребуется осуществить передачу данных между host и device. Следуя [313], можно разделить общую нагрузку W на две части. Одна часть $W(1 - \alpha)$ обрабатывается на CPU, а $W\alpha$ обрабатывается с помощью GPU. Время счета всей программы дается выражением $T = \max\{T_{CPU}, T_{GPU}\}$, где T_{CPU} и T_{GPU} – времена счета для CPU и GPU. Время счета минимально при следующем значении α

⁶Даже если по логике кода программы нет явного перемещения памяти, операционная система может «по своему усмотрению» переместить данные (например, выгрузить на жесткий диск из оперативной памяти и обратно). Однако специальный драйвер (блок управления памятью), выполняющий функции посредника между программой и физической памятью, скрывает от пользователя и программиста этот процесс [316–318]. По сути указатели в C++ или FORTRAN хранят адреса в виртуальном адресном пространстве виртуальной памяти, а не физическом, что существенно облегчает разработку программ.

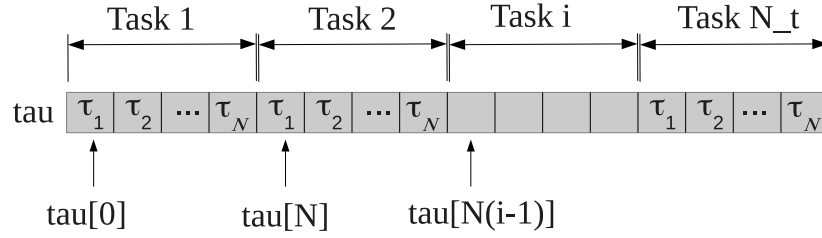


Рисунок 3.18 — Структура входного массива оптических толщин для N_t задач. Элемент $\tau[N(i-1)]$ является первым элементом для задачи под номером i .

$$\alpha = \frac{1}{1 + \frac{S^{CPU}}{S^{GPU}}}, \quad (3.29)$$

где S^{CPU} – ускорение из-за использования нескольких CPU, S^{GPU} – ускорение, полученное на GPU, относительно времени выполнения алгоритма на одном CPU.

3.9.4 Стратегия параллельных вычислений

3.9.4.1 Организация данных

Для тестирования различных методов распараллеливания был составлен массив исходных данных для 370 пикселей. Исходные данные для каждого пикселя включают в себя геометрические параметры и оптические параметры для 88 длин волн. Используются 20-слойная и 40-слойная модели атмосферы. Массив оптических параметров содержит оптические толщины, альbedo однократного рассеяния, коэффициенты разложения по полиномам Лежандра и ламбертовское альbedo поверхности. Массив выходных данных состоит из значений яркости для каждой длины волны. Следуя рекомендациям из [311], исходные данные организованы в виде нескольких одномерных массивов. Структура массива для оптических толщин показана на рисунке 3.18. Остальные массивы организованы по аналогии.

Распараллелить расчет спектра можно несколькими способами. Первый способ заключается в распараллеливании по задачам (по длинам волн и по пикселям). Фактически перенос расчета на GPU заменяет использование цикла «for» по всем задачам. Эта стратегия показана на рисунке 3.19. Второй способ основан на том, что метод дискретных ординат требует выполнения большого количества матричных операций. Каждая матричная операция может быть выполнена несколькими потоками, и, таким образом, целая задача обрабатывается несколькими потоками. Эта стратегия была предложена в работе [75] и показана на рисунке 3.20. Она реализуется с помощью библиотек типа MKL.

Strategy 1

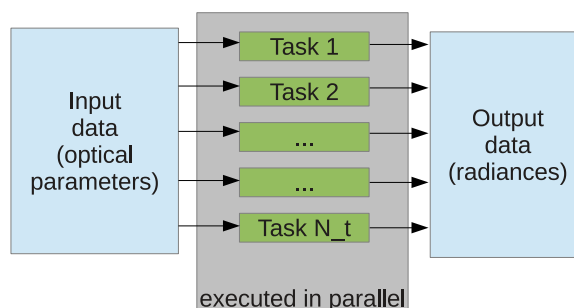


Рисунок 3.19 — Стратегия параллельных вычислений №1: один поток обрабатывает одну задачу.

Strategy 2

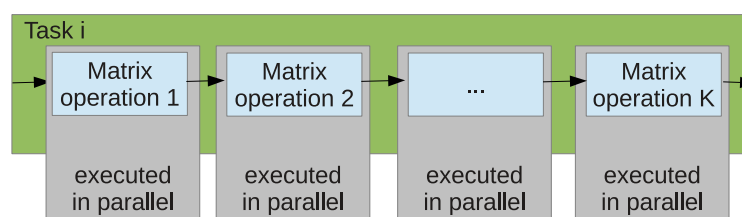


Рисунок 3.20 — Стратегия параллельных вычислений №2: каждая матричная операция в рамках решения одной задачи обрабатывается несколькими потоками.

При решении некоторых задач выгодно распараллелить только часть алгоритма с «вычислительной нагрузкой» β на GPU, а оставшуюся часть $(1 - \beta)$ выполнить на CPU. В этом случае максимальное ускорение, полученное за счет параллельных вычислений, ограничено согласно закону Амдала (*Amdahl's law*) [319]:

$$S < \frac{1}{\frac{\beta}{N_t} + (1 - \beta)}, \quad (3.30)$$

где S – общее ускорение алгоритма, N_t – количество потоков, рассчитывающих часть β .

3.9.4.2 Реализация с помощью OpenMP

Параллелизм с помощью OpenMP реализуется легко. Далее приведен пример распараллеливания цикла с помощью OpenMP (для улучшения читаемости кода в нем показан только массив `tau` из массивов исходных данных) :

```

1 //number of pixels
2 #define N_px 370
3 //number of wavelengths
4 #define N_wl 88
5 //number of independent tasks
6 #define N_tasks N_px*N_wl
  
```

```

7 // number of layers
8 #define N 40
9 ...
10 #pragma omp parallel for
11 for (int i = 0; i < N_tasks; i++)
12     RTE(&tau[N*i], ..., &I[i]);

```

Чтобы снизить затраты на выделение памяти, можно организовать вызов солвера через вызов соответствующего метода объекта. Причем количество объектов равно количеству потоков. Пример такого подхода показан ниже:

```

1 //number of pixels
2 #define N_px 370
3 //number of wavelengths
4 #define N_wl 88
5 //number of independent tasks
6 #define N_tasks N_px*N_wl
7 //number of layers
8 #define N 40
9 ...
10 #pragma omp parallel private(i, th_id)
11 {
12     th_id = omp_get_thread_num();
13     nthreads = omp_get_num_threads();
14     RTE_solver *run_rte = new RTE_solver(<initializing
15         parameters>);
16     for(i=th_id; i<N_tasks; i+=nthreads)
17         run_rte->RTE(&tau[N*i], ..., &I[i]);
18     ...
19     delete run_rte;
20 }

```

В этом примере каждый поток создает свой экземпляр класса и выделяет память под него только один раз. Далее, зная свой ID, поток читает свою порцию исходных данных из общего массива исходных данных. В проведенных тестах относительная разница между временами счета представленных реализаций не превышает 15 % при использовании оптимизации (флага компилятора -O2).

Программа должна быть скомпилирована и собрана с помощью специального флага OpenMP (так, например, «-fopenmp» для компилятора g++). Для измерения времени счета из кода программы следует пользоваться специальной функцией `omp_get_wtime()` вместо стандартной функции `clock()`. Подробная информация об особенностях реализации OpenMP доступна в руководстве [289].

В случае, если задачи полностью независимы, ускорить обработку данных можно запустив несколько процессов. Для этой цели можно использовать утилиту для shell – GNU parallel ⁷ [320].

⁷<http://www.gnu.org/software/parallel/>

3.9.4.3 Реализация с помощью CUDA

Разработка кода для CUDA является более трудоемкой задачей, чем организация параллельных вычислений с помощью OpenMP. Для алгоритмов, в которых «вычислительная нагрузка» (the workload) сосредоточена в одной процедуре, существенное ускорение можно получить, перенеся выполнение этой процедуры на GPU. В алгоритме, основанном на методе дискретных ординат, нагрузка распределена почти равномерно по коду в виде матричных операций. Таким образом, имеет смысл перенести на GPU весь алгоритм целиком. Размерность матриц, участвующих в алгоритме, зависит от числа дискретных ординат N_{do} . Большинство матриц имеют размер $N_{\text{do}} \times N_{\text{do}}$ и $2N_{\text{do}} \times 2N_{\text{do}}$. При расчете спектра в полосе Хюггинса число дискретных ординат $N_{\text{do}} \in [4, 16]$ обеспечивают необходимую точность.

Основными задачами кода, исполняемого на CPU, являются подготовка исходных данных, выделение памяти и асинхронная передача данных с CPU в GPU и обратно. Возможная реализация приведена ниже (для облегчения читабельности кода из входных массивов показан только массив оптических толщин):

```
1 // declaration of cuda streams
2 cudaStream_t *stream = (cudaStream_t *) malloc(n_streams *
3         sizeof(cudaStream_t));
4 // allocation in the CPU pinned memory
5 cudaMallocHost((void**)&Tau, total_wavelengths*N_layers*sizeof(
6         float)); cudaMallocHost((void**)&I, total_wavelengths*sizeof(
7         float));
8 ...
9 // allocation in the GPU memory
10 cudaMalloc((void**)&Tau_cuda, N_layers*total_wavelengths*
11         sizeof(float));
12 cudaMallocHost((void**)&I_cuda, total_wavelengths*sizeof(float)
13         );
14 ...
15 //Prepare input data
16 Read_from_file(..., Tau, ...);
17 //loop over CUDA streams
18 for(int i_stream=0; i_stream<n_streams; i_stream++){
19 //Asynchronous data transfer from host to device
20 cudaMemcpyAsync(Tau_cuda+size_Tau*i_stream/n_streams, Tau+
21         size_Tau*i_stream/n_streams, size_Tau*sizeof(float)/
22         n_streams, cudaMemcpyHostToDevice, stream[i_stream] );
23 // launching the kernels
24 CALL RTE_on_CUDA<<<total_wavelengths/n_threads/n_streams,
25         n_threads, 0, stream[i_stream]>>>(...,
26         Tau_cuda+size_Tau*i_stream/n_streams, ...
27         I_cuda+size_I*i_stream/n_streams);
28 // Asynchronous output data transfer from device to host
29 cudaMemcpyAsync(I+size_I*i_stream/n_streams, I_cuda+size_I*
30         i_stream/n_streams, N2*total_wavelengths*sizeof(
31         float)/n_streams, cudaMemcpyDeviceToHost, stream[i_stream]);
32 }
```

```

21 // overlapped with kernel execution
22 CALL_CPU_RTE_MODEL();
23 // synchronize threads
24 cudaThreadSynchronize();
25 // destroy CUDA streams
26 for(int i_stream = 0; i_stream < n_streams; i_stream++)
27 cudaStreamDestroy(stream[i_stream]);
28 // deallocation in the GPU memory
29 cudaFree(Tau_cuda);
30 ...
31 cudaFreeHost(I_cuda);
32 // deallocation in the CPU pinned memory
33 cudaFreeHost(Tau);
34 ...
35 cudaFreeHost(I);

```

Реализация кода GPU (CUDA kernel) имеет вид:

```

1  __global__ void CALL_RTE_on_CUDA(..., float *Tau0, ..., float
    *I)
2  {
3      ...
4      int t_id;
5      float Tau0_local[N_Layer];
6      t_id = threadIdx.x + blockIdx.x*blockDim.x;
7      ...
8      // for the thread reads the input data from the global
        memory
9      for(int iLayer = 0; iLayer < N_layers; iLayer++)
10         Tau0_local[iLayer] = Tau0[t_id*N_layers+iLayer];
11         <radiative transfer solver>
12 }

```

Возможны альтернативные реализации CUDA kernel:

- Все массивы, включая временные, размещаются в глобальной памяти, как показано на рисунке 3.21. Такую стратегию легко реализовать. Каждый поток (thread) требует незначительного количества регистров, и число одновременно реализуемых в единицу времени потоков может быть высоким. Однако из-за большого времени доступа к глобальной памяти скорость счета при такой реализации обычно не выше скорости счета 1-2 CPU. Такая реализация используется только в целях тестирования.
- Все временные массивы располагаются в регистрах, как показано на рисунке 3.22. Обращение к глобальной памяти требуется только для считывания исходных данных и записи результата. Однако каждый поток требует большого количества регистров. Поэтому число одновременно выполняемых потоков будет ограничено размером регистров.
- На GPU выполняется только часть алгоритма, например, подпрограмма объединения слоев.

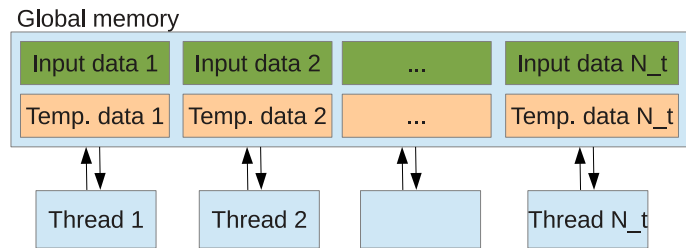


Рисунок 3.21 — Организация памяти в GPU: все массивы, включая временные, расположены в глобальной памяти.

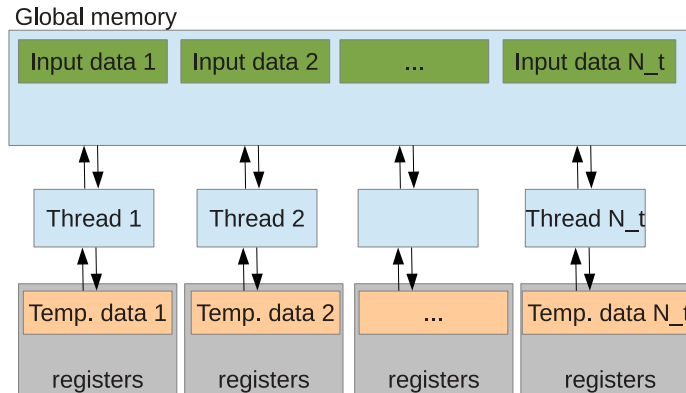


Рисунок 3.22 — Организация памяти в GPU: все временные массивы расположены в регистрах.

3.9.5 CPU/GPU параллелизм – скорость счета

3.9.5.1 Сравнение производительности для OpenMP-реализации

Тесты выполнены на машине Intel Xeon CPU E5-1620 3.60GHz с 8 CPU на 4 ядрах (далее Intel (8 CPUs)). Также в общее сравнение включены результаты, полученные на AMD Opteron 4176 HE 2.4GHz (12 CPUs) (далее AMD (12 CPUs)) и AMD Opteron 6282 SE 2.6 GHz (32 CPUs) (далее AMD (32 CPUs)).

8-поточковая модель распараллелена с помощью OpenMP согласно стратегии, описанной в части 3.9.4.2. Ускорение относительно времени счета на 1 CPU показано на рисунке 3.23. Ускорение зависит линейно от числа используемых CPU при малом числе CPU. Далее с ростом числа используемых CPU вклад каждого дополнительного CPU в суммарное ускорение уменьшается, а при числе CPU большем 10 использование последующего CPU может даже уменьшить скорость счета. В этом случае выгодно использовать утилиту GNU parallel. Тесты показывают, что число потоков по умолчанию иногда не обеспечивают максимальную производительность. Например, по умолчанию на AMD (32 CPUs) используются 32 потока, в то время как оптимальное количество потоков 10. При использовании более 10 потоков ускорение уменьшается. Такое поведение объясняется тем, что интерфейс OpenMP

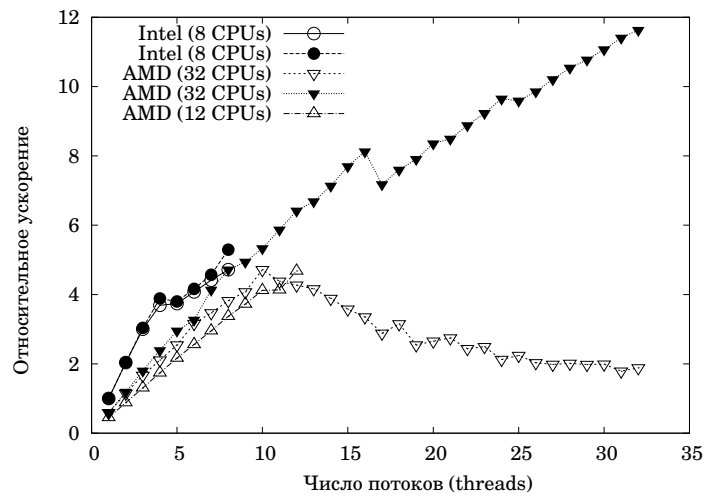


Рисунок 3.23 — Ускорение относительно времени счета алгоритма на одном CPU: черные точки относятся к реализации с GNU parallel, белые точки относятся к реализации с OpenMP.

Таблица 3.5 — Ускорение с помощью OpenMP. Числа в круглых скобках показывают ускорение, полученное с помощью GNU parallel

Название машины	Speedup	Ускорение / макс. ускорение
AMD (12 CPUs)	10.4 (11.6)	87 %
AMD (32 CPUs)	7.9 (18.1)	56 %
Intel (8 CPUs)	4.7 (4.97)	59 %

распределяет данные в памяти не оптимальным образом для многопроцессорных систем. В результате время доступа к памяти из некоторых процессоров велико и существенно замедляет работу программы [321]. Для получения максимальной производительности разработчик должен разрабатывать код, исходя из архитектуры системы, как описано в [322]. Однако такой подход более трудоемкий, чем использование OpenMP или GNU parallel.

3.9.5.2 Сравнение производительности для базовых матричных операций

Как правило, алгоритмы обработки матриц большой размерности выполняются на 2-3 порядка быстрее на GPU-платформах, чем на CPU. Однако, если размер матриц невелик (меньше 100×100), как в рассматриваемом случае, то скорость счета на GPU может быть сопоставима со скоростью счета на CPU из-за того, что требуется дополнительное время на инициализацию CUDA и пересылку данных. Для того, чтобы оценить потенциальное ускорение на GPU, были выполнены несколько тестов с базовыми матричными операциями, используемыми в радиационных кодах: произведение матриц, задача на собственные значения

и LU –факторизация. Вычисления организованы в пакетном режиме (batched mode), когда одновременно обрабатываются несколько матриц (в представленных тестах 10^5 матриц). В расчетах также используется библиотека cuBLAS – оптимизированная для GPU библиотека BLAS. Современные видеокарты (с *compute capability* ≥ 3.5) поддерживают динамический параллелизм. Это значит, что каждый поток на GPU может породить свое множество потоков (иными словами, CUDA-ядро может быть порождено не только процессом на CPU, но и другим CUDA-ядром). Интересное следствие из этого состоит в том, что cuBLAS-функции могут быть вызваны непосредственно из кода GPU.

Проведем сравнение между 4 кодами:

- Код №1: код, ускоренный с помощью OpenMP;
- Код №2: код, реализованный на CUDA, причем матрицы размещены в глобальной памяти GPU;
- Код №3: код, реализованный на CUDA, причем матрицы размещены в регистрах GPU;
- Код №4: код, ускоренный с помощью библиотеки cuBLAS. Сравнение сделано только для перемножения матриц, так как солвер для нахождения собственных значений в библиотеке cuBLAS отсутствует, а функция LU –декомпозиции (cublasSgetrfBatched) может быть вызвана только из кода CPU, но не из ядра GPU.

Во всех кодах, кроме кода №1, используется асинхронная передача данных. Во всех кодах, кроме кода №4, матрица обрабатывается одним потоком. В коде №4 используется динамический параллелизм: функция cuBLAS вызывается из ядра CUDA, при этом создается дочернее множество CUDA-ядер. Произведение матриц рассчитается с помощью нескольких потоков, количество которых определяется автоматически функцией cuBLAS. Исходная задача распараллеливается на максимальное количество потоков. Однако дочернее ядро может обрабатывать массивы, находящиеся только в глобальной памяти. Необходимо найти компромисс между большим числом потоков и быстрым доступом к памяти. Очевидно, оптимальная стратегия будет зависеть от размера матриц.

На рисунках 3.24, 3.25, 3.26 показаны результаты сравнения ускорения относительно реализации на 1 CPU для матриц размера 8×8 , 32×32 и 128×128 , соответственно. Во всех тестах код №1, выполняемый на 8 CPU, быстрее в 4.7 раза, чем код, выполняемый на 1 CPU. Производительность кода №2 меньше, чем производительность кода №1. Напротив, код №3 показывает наибольшую скорость счета. Однако обработка матриц размера больше 64×64 в

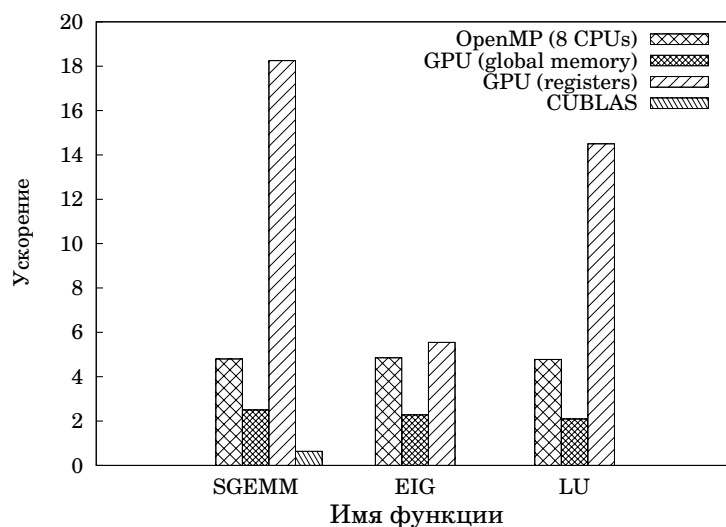


Рисунок 3.24 — Сравнение производительности для базовых матричных операций. Размер матриц 8×8 . SGEMM обозначает произведение матриц, EIG – нахождение собственных векторов и значений, LU – LU –декомпозиция.

задачах SGEMM и EIG требует памяти больше, чем регистры. Ускорение с помощью cuBLAS (код №4) сильно зависит от размера матриц и меняется от 0.64 для матриц размера 8×8 до 170 для матриц размера 128×128 . Эти результаты показывают, что динамический параллелизм имеет смысл использовать для матриц размера больше, чем 32×32 . Для меньших матриц самым быстрым является код №3. Таким образом, выбрана следующая стратегия: все матрицы, используемые в солвере, размещаются в регистрах, при этом одна задача обрабатывается одним потоком.

3.9.5.3 Сравнение производительности для двухпоточковой модели и TMS-коррекции

TMS-коррекция и двухпоточковое приближение реализованы как независимые CUDA-ядра. Для обоих используются асинхронная передача данных (ADT) и выделение памяти pinned memory (PM). Полученные ускорения показаны на рисунке 3.27 и на GPU равны 18 и 53 для TMS-коррекции и двухпоточкового приближения, соответственно. Использование ADT ускоряет расчет в первом случае почти на 80 %. Время выполнения вычислений для TMS-коррекции сопоставимо с временем пересылки данных из памяти CPU в память GPU. Технология ADT позволяет «скрыть» время пересылки за счет того, что вычисления могут начаться сразу после того, как первая порция данных передана в глобальную память GPU. Расчеты в двухпоточковом приближении более сложные; и поэтому ускорение благодаря ADT

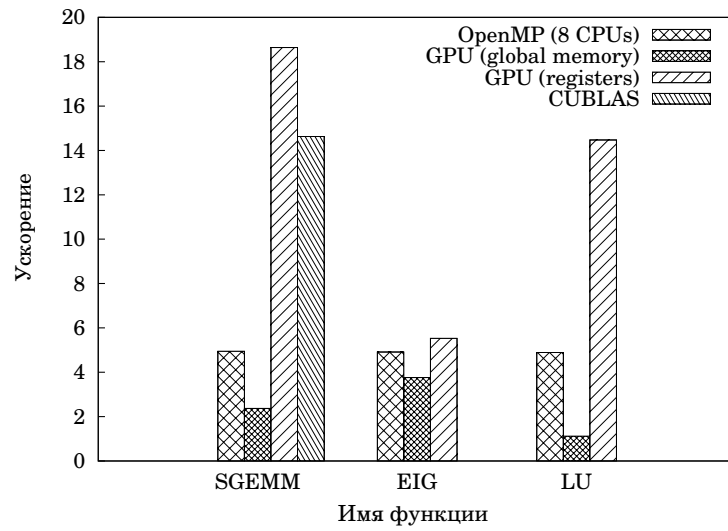


Рисунок 3.25 — То же, что и на рисунке 3.24, но для матриц размера 32×32 .

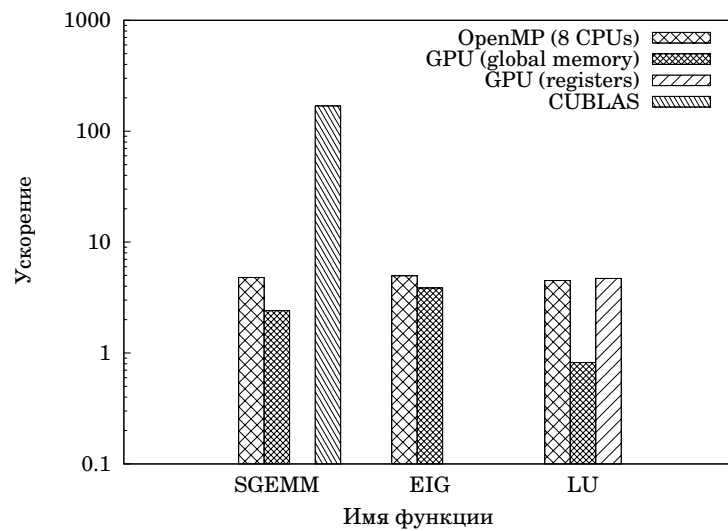


Рисунок 3.26 — То же, что и на рисунке 3.24, но для матриц размера 128×128 . Для тестов EIG и LU матрицы не помещаются в регистры. Поэтому соответствующие данные отсутствуют.

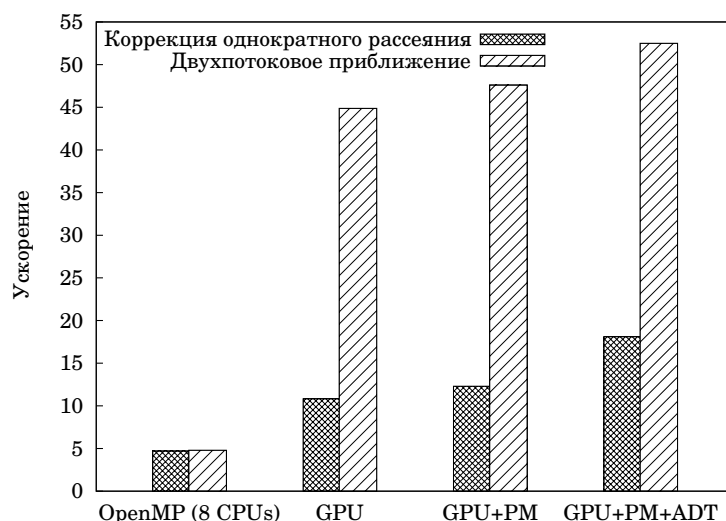


Рисунок 3.27 — Ускорение TMS-коррекции и двухпотокного приближения с помощью OpenMP и GPU (ADT обозначает «асинхронная передача данных», PM – pinned memory).

всего 15 %. На рисунке 3.28 показано графическое изображение времени счета, полученное с помощью профайлера NSight profiler tool⁸.

3.9.6 Сравнение производительности для мультипоточковой модели

3.9.6.1 Метод с глобальной матрицей

Использование метода с глобальной матрицей на GPU ограничено памятью регистров. Размер глобальной матрицы превышает размер регистров при $N_{layers} > 10$ и $N_{do} > 8$. Можно было бы разместить матрицу в глобальной памяти GPU. Однако постоянное обращение к глобальной памяти приводит к низкой производительности программы в целом. Для демонстрации были реализованы и сравнены две версии алгоритма с глобальной матрицей. В первой все массивы хранятся в регистрах, а во второй глобальная матрица (наибольший массив из всех используемых) хранится в глобальной памяти. Соответствующие ускорения, а также ускорение с помощью OpenMP, показаны в таблице 3.6. Заметим, что каждая задача «потребляет» много памяти для хранения глобальной матрицы. Как следствие, количество регистров является фактором, лимитирующим число одновременно выполняемых потоков на GPU.

⁸<https://developer.nvidia.com/nvidia-visual-profiler>

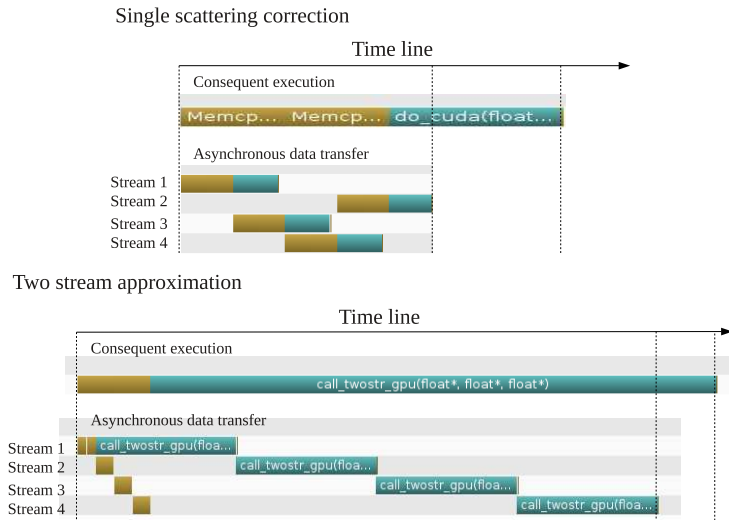


Рисунок 3.28 — Соккрытие времени передачи данных с помощью ADT на примере четырех CUDA-потоков (CUDA-streams): коррекция однократного рассеяния (сверху) и двухпотоковое приближение (снизу).

Таблица 3.6 — Ускорение мультипоточковой модели с глобальной матрицей

N_{do}	N_{layers}	Ускорение		
		OpenMP (8 CPUs)	GPU (регистры)	GPU (глобальная память)
4	16	4.7	8.7	0.5
8	8	4.5	6.1	0.5

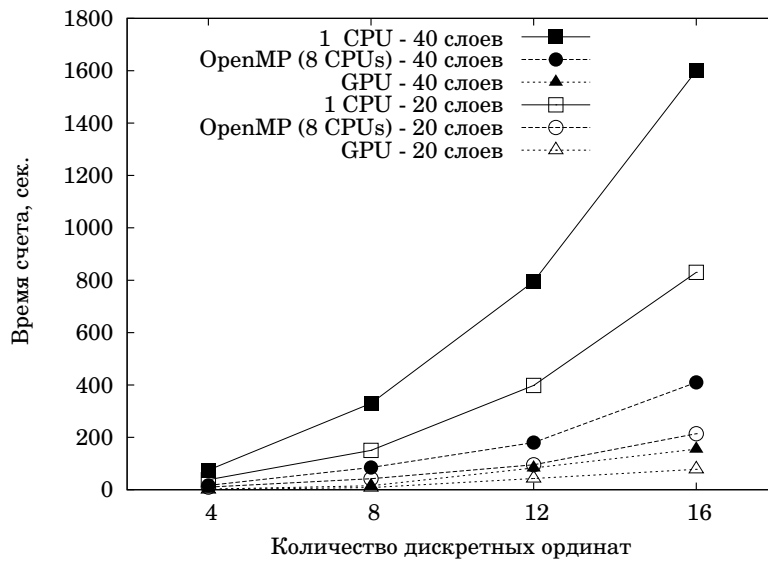


Рисунок 3.29 — Время счета для метода дискретных ординат с матрично-операторным методом.

3.9.6.2 Матрично-операторный метод

При использовании матрично-операторного метода потребляемая память не зависит от числа слоев. Большинство матриц, используемых в расчете, имеет размерность $N_{do} \times N_{do}$. Все промежуточные массивы хранятся в регистрах. Таким образом, проблема медленного доступа к элементам массива решена. Время счета, а также полученное ускорение как функция количества дискретных ординат показаны на рисунках 3.29 и 3.30, соответственно. Ускорение для $N_{do} = 16$ меньше почти в три раза для $N_{do} = 4$. Потребляемая память квадратично зависит от числа дискретных ординат. С учетом ограниченного размера регистров, чем больше потребляемая память, тем меньшее количество CUDA-ядер выполняются одновременно.

3.9.7 Ускорение моделей переноса с использованием снижения размерности исходных данных

Помимо уже рассмотренных стратегий распараллеливания на GPU можно предложить еще несколько. Например, можно было бы перенести на GPU только часть алгоритма. Такой подход эффективен, когда вычислительная нагрузка сконцентрирована в какой-то определенной части алгоритма. Тогда максимальное ускорение будет ограничено законом Амдала 3.30. Профайлер показывает, что 30 % времени тратится на задачу на собственные значения, 20 % – объединение слоев в стек, 20 % – расчет матриц отражения и пропускания. Таким образом, нельзя выделить часть алгоритма, ускорив которую, мы можем получить суще-

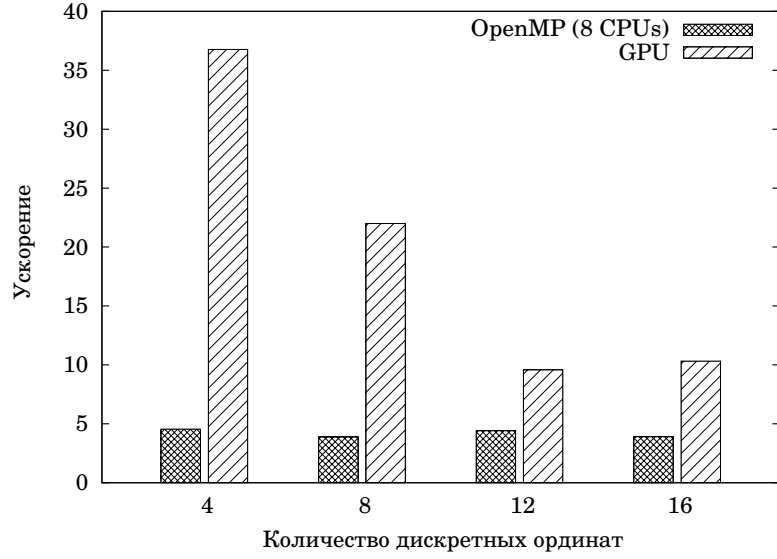


Рисунок 3.30 — Ускорение метода дискретных ординат с матрично-операторным методом относительно времени счета на одном CPU.

ственное ускорение всего алгоритма. Другая стратегия заключается в реализации расчета только с использованием функций cuBLAS. Тогда каждая задача обрабатывается несколькими потоками. К сожалению, в cuBLAS отсутствует подпрограмма для расчета собственных векторов/значений.

Напомним, что при снижении размерности исходных данных для каждого пикселя вместо 88 вызовов мультипоточковой модели необходимо вызвать только 5 раз мультипоточковую модель и 88 раз двухпоточковую модель, а также рассчитать собственные вектора для ковариационной матрицы исходных данных. Пусть некий алгоритм состоит из n частей. Определим нагрузку i -той части как отношение времени счета данной части алгоритма ко времени счета всего алгоритма. Обозначим нагрузку i -той части за W_i , $i = 1, \dots, n$. Также предположим, что нам удалось ускорить каждую часть, так что ускорение части i равно S_i . Тогда ускорение всего алгоритма можно вычислить как

$$S_{\text{total}} = \left(\sum_{j=1}^n \frac{W_j}{S_j} \right)^{-1}. \quad (3.31)$$

Далее, можно ввести приведенную нагрузку для части i :

$$\bar{W}_i = \frac{W_i/S_i}{\sum_{j=1}^n \frac{W_j}{S_j}}. \quad (3.32)$$

Таблица 3.7 — Время счета и ускорения различных частей модели переноса излучения с снижением размерности исходных данных при $N_{\text{до}} = 8$

Алгоритм	W_i	S_i	\bar{W}_i
Мультипоточковая модель	50%	22	34.8%
Двухпоточковая модель	25%	53	7.2%
Метод главных компонент	20%	6	51%
TMS-коррекция	1%	20	0.77%
остальное	4%	~ 10	6.12%

Соответствующие значения W_i и S_i при $N_{\text{до}} = 8$ приведены в Таблице 3.7. С учетом этих данных ускорение всего алгоритма $S_{\text{total}} \approx 15$; фактическое ускорение равно $S_{\text{total}} \approx 12$. Заметим, что если на CPU основная нагрузка связана с мультипоточковой моделью, то после оптимизации и перевода расчета на GPU основная нагрузка приходится на метод главных компонент. Лимитирующим фактором оказывается расчет собственных векторов и собственных значений.

Наконец, для получения максимального ускорения мы используем технику перекрытия расчета на GPU вычислениями на CPU. Оптимальное распределение нагрузки между CPU и GPU дается формулой 3.29. С учетом того, что $S^{GPU} = 12$ и $S^{CPU} = 4.7$, оптимальное отношение равно $\alpha = 0.71$. При этом достигается общее ускорение 16 раз.

Результаты Главы 3

В данной главе были рассмотрены методы эффективного расчета сигнала гиперспектральных систем. Был развит метод снижения размерности оптических данных для ускорения расчета спектров отраженного излучения, а также был проведен анализ методов ускорения расчетов для модели атмосферы с облаком в приближении независимых пикселей. Подытожить Главу 3 можно следующими результатами:

1. На основе идей, изложенных в [49, 269], развита модель переноса излучения с использованием снижения размерности исходных оптических данных. Модель обобщена на произвольный метод снижения размерности. Были рассмотрены методы локального линейного вложения и дискретно-ортогональные преобразования. Линеаризованная модель была построена таким образом, что её структура не зависит от выбора метода снижения размерности.

2. Максимальная ошибка в полном содержании озона, восстановленном с помощью модели, включающей метод главных компонент, меньше 0.006. При этом расчет был ускорен в 6.24–8.06 раз.
3. Методы локального линейного вложения более точные, чем метод главных компонент, за счет лучшего описания нелинейностей в исходных данных при сопоставимой скорости счета. Так, например, ошибка метода LPP почти в два раза меньше ошибки метода главных компонент, а время счета отличается менее чем на 10 %.
4. Расчет со слоем облака может быть оптимизирован за счет сохранения временных массивов при решении задачи для системы без облака и последующего использования при решении задачи с облаком. Такой подход является численно точным и приводит к ускорению расчета почти в два раза.
5. В контексте моделей с использованием методов снижения размерности также предложен метод оптимизации, основанный на расчете спектральной коррекции решения для модели с облаком на основе двухпоточкового приближения. Показано, что спектральная коррекция достаточно хорошо аппроксимируется линейной функцией (средняя ошибка $\sim 0.1\%$ при максимальной ошибке $< 0.2\%$), если при оптической толщине облака не превышающей 5. При оптической толщине 10 и более рекомендуется использовать нелинейную коррекцию, в которой квазипериодическая структура корректирующей функции описывается с помощью сечения поглощения озона. Средняя ошибка при этом порядка 0.05% при максимальной ошибке $< 0.2\%$. К достоинствам данного метода можно отнести то, что алгоритм решения уравнения переноса остается неизменным.
6. Алгоритм расчета спектра с использованием метода главных компонент был реализован на CUDA, что позволило ускорить расчет в 16 раз.

ГЛАВА 4. Моделирование яркости, отраженной от атмосферы со стохастической облачностью

"There are no rules of architecture for a castle in the clouds"

Gilbert K. Chesterton

4.1 Методы учета горизонтальной неоднородности среды

Глава 4 и Глава 5 посвящены методам решения уравнения переноса, которые позволяют учесть неоднородность среды. Востребованность моделей переноса, выходящих за рамки одномерных, обусловлена высоким пространственным разрешением ($7 \text{ км} \times 7 \text{ км}$) современных сенсоров типа Sentinel 5 Precursor. В наших построениях будем считать, что неоднородность обусловлена наличием в системе облака с меняющимися по пространству характеристиками (прежде всего, коэффициентом экстинкции). Так как облако имеет сложную трехмерную структуру на всех уровнях детализации, точно описать его достаточно сложно. Для описания свойств облака применяют специальные модели, примерами которых могут служить модель ограниченного каскада (bounded cascade model) [323, 324], модель кучевых облаков Frank Evans [325], модель ледяных облаков Robin Hogan и Sarah Kew [326, 327], мультифрактальная P-Model [174], tdMAP [328]. В этом контексте становится актуальной задача о создании алгоритмов решения уравнения переноса, способных включать в себя модели неоднородного облака. Нашей целью будет построение и анализ соответствующих методов решения уравнения переноса.

Мы рассмотрим три подхода. Первый из них основан на моделях внутреннего и внешнего смешивания (*internal and external mixing models*). Модель внутреннего смешивания предполагает решение одномерного уравнения переноса для среды с усредненными по горизонтальным координатам параметрами. Модель внешнего смешивания реализуется через решение краевой задачи для набора одномерных случаев и последующего усреднения функции яркости. Метод расчета с использованием параметра облачности, описанный в Главе 3, является примером такой модели. Достоинством такого подхода является простота и высокая скорость

счета. Фактически его реализация не выходит за рамки одномерного алгоритма решения уравнения переноса.

Второй метод – стохастический, в котором ставится задача о нахождении средней яркости и её статистических моментов при заданных статистических свойствах среды. Свойства облака неоднородны, а на его геометрию оказывают влияние турбулентные процессы. Поэтому имеет практический смысл рассматривать облако как стохастическую рассеивающую среду. Перенос излучения рассматривается как стохастический процесс, при этом уравнение переноса должно связывать статистические параметры облака со статистическими параметрами излучения. Этот подход более трудоемкий, чем предыдущий. Он сводится к решению уравнения, аналогичному по форме векторному уравнению (т.е. уравнению, учитывающему поляризацию излучения). В результате скорость решения стохастического уравнения на порядок медленнее одномерного скалярного уравнения переноса. Однако стохастический подход по сравнению с предыдущим позволяет более точно учесть влияние неоднородности среды на пространственное и угловое распределения излучения. Стохастический метод развивался в работах Г.А.Титова и формализовался в методе замкнутых уравнений. Как было замечено Г.А.Титовым в [208], «At present, the MonteCarlo method is, in fact, the only procedure for solving the problem of radiative transfer for ... media [with complex irregular geometric structure]». За более чем 20 лет, ситуация изменилась в плане возможностей детерминистических алгоритмов решения 3D задач. В частности, как показано в [227] нельзя сделать однозначный выбор в пользу одного из подходов (всё определяется задачей). В этой Главе идеи Г.А.Титова будут реализованы и доведены до числа с помощью детерминистических методов решения УПИ.

Третий метод – решение уравнения переноса в двумерной и трехмерной геометриях, где функция яркости зависит от нескольких пространственных координат. Этот подход применим для систем с произвольными неоднородностями и геометрией. Однако решение уравнения переноса в многомерном случае имеет два основных недостатка. Первый из них – большое время счета, которое делает невозможным использование многомерных алгоритмов для обработки спектров в режиме реального времени. Второй недостаток связан с тем, что для постановки многомерной задачи требуется большое количество исходных данных, например, информация о расположении облака и его конфигурации. Зачастую такие данные недоступны, а программы генерации облаков могут лишь воспроизвести систему с заданными статистическими закономерностями. Поэтому решать трехмерную задачу для таких «искусственно сгенерированных» облаков порой не имеет смысла. К тому же, локальные свойства

среды могут играть второстепенную роль в формировании пространственного распределения яркости. Отметим, что стохастический метод занимает промежуточное положение и по трудоемкости, и по точности описания процесса переноса излучения. Имеет смысл использовать многомерные алгоритмы для верификации двух первых подходов.

В этой Главе описаны стохастическая модель и модели внутреннего и внешнего смешивания. Мы рассмотрим стохастический подход и проведем сравнение указанных методов на примере реальных моделей атмосферы с облаком в едином контексте. Для верификации развитых моделей используется многомерный код SHDOM. Решение многомерного уравнения переноса и соответствующая линеаризованная модель будут рассмотрены в следующей Главе.

4.2 Стохастическая теория переноса излучения для модели разорванной облачности

4.2.1 Математическая постановка задачи

Рассмотрим модель атмосферы, в которой есть облако произвольной конфигурации. Уравнение переноса излучения для диффузионной компоненты I в точке \mathbf{r} в направлении $\mathbf{\Omega}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = & - [\sigma_{\text{ext}}^0(\mathbf{r}) + \sigma_{\text{ext}}^1(\mathbf{r})] I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [\sigma_{\text{sct}}^0(\mathbf{r}) P_0(\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}') + \sigma_{\text{sct}}^1(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}')] I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\Omega' \\ & + \frac{F_{\odot}}{4\pi} [\sigma_{\text{sct}}^0(\mathbf{r}) P_0(\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}_{\odot}) + \sigma_{\text{sct}}^1(\mathbf{r}) P_1(\mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}_{\odot})] T_{\odot}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4.1)$$

где $\sigma_{\text{ext}}^{0,1}$, $\sigma_{\text{sct}}^{0,1}$ и $P_{0,1}$ – коэффициент экстинкции, коэффициент рассеяния и индикатрисы рассеяния в чистом небе (с индексом 0) и в облаке (с индексом 1), соответственно, $\mathbf{\Omega}_{\odot} = (\pi - \theta_{\odot}, \varphi_{\odot})$ с $\mu_{\odot} = \cos \theta_{\odot} > 0$ – направление падения солнечного излучения, F_{\odot} – солнечный поток, $T_{\odot}(\mathbf{r}) = e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}(\mathbf{r})}$ – коэффициент пропускания прямого солнечного излучения, $\tau_{\text{ext}}^{\odot}$ – оптическая толщина. Предположим, что индикатриса рассеяния и альбеда однократного рассеяния облака ω_1 , определенное как $\omega_1 = \sigma_{\text{sct}}^1(\mathbf{r}) / \sigma_{\text{ext}}^1(\mathbf{r})$, не зависят от \mathbf{r} . Коэффициент экстинкции для облака представим в виде

$$\sigma_{\text{ext}}^1(\mathbf{r}) = \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

где $\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}$ – детерминированная функция, равная максимальному значению коэффициента экстинкции, а f – случайная функция от координат. Тогда коэффициент рассеяния облака примет вид

$$\sigma_{\text{sct}}^1(\mathbf{r}) = \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}}(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}),$$

где $\sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} = \omega_1 \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}$. Случайная функция f описывает распределение облака и его статистику. В случае разорванной облачности, которая описывается с помощью модели двоичных статистических смесей (*binary statistical mixtures*), f может принимать одно из двух значений: $f(\mathbf{r}) = 1$ в облаке, $f(\mathbf{r}) = 0$ в ясном небе. Поэтому для модели разорванной облачности справедливо $f = f^2$. В общем случае, например, для модели ограниченного каскада (*bounded cascade cloud model*), $f \neq f^2$. В модели разорванной облачности f называется случайной функцией-индикатором (*random indicator function*). Усредненный по ансамблю коэффициент экстинкции равен $\overline{\sigma_{\text{ext}}^1} = \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f}$ (здесь и далее \bar{X} означает усредненный по ансамблю параметр X).

Для облака, находящегося в плоско-параллельной бесконечной в горизонтальных направлениях атмосфере, уравнение переноса (4.1) необходимо дополнить граничными условиями для верхней и нижней границ атмосферы. Граничное условие на верхней границе имеет вид

$$I(\mathbf{r}_t, \boldsymbol{\Omega}_-) = 0,$$

на нижней границе находится подложка с ламбертовским законом отражения и соответствующим альбедо поверхности A :

$$I(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}_+) = \frac{A}{\pi} F_{\odot} |\mu_{\odot}| e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}(\mathbf{r}_s)} + \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| I(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}_-) d\Omega, \quad (4.3)$$

где \mathbf{r}_t и \mathbf{r}_s – точки на верхней и нижней границах, а $\boldsymbol{\Omega}_+$ и $\boldsymbol{\Omega}_-$ обозначают направления вверх и вниз, соответственно.

4.2.2 Стохастическая модель n -ого порядка

Так как коэффициент экстинкции облака $\sigma_{\text{ext}}^1(\mathbf{r})$ является случайной функцией, функция яркости $I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ также является случайной функцией. Представим величины f , I и $e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}$ как суммы их средних значений \bar{f} , \bar{I} и $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$ и их случайных флуктуаций f' , I' и $(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'$,

соответственно¹,

$$f = \bar{f} + f', \quad I = \bar{I} + I', \quad e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}} = \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'. \quad (4.4)$$

Применяя процедуру статистического усреднения, можно получить бесконечную систему уравнений для средней яркости и ковариаций I и f . Эта цепочка уравнений должна быть оборвана на определенном шаге и затем замкнута с помощью какой-либо гипотезы о ковариациях высокого порядка. Далее мы получим стохастическую модель n -ого порядка для произвольной статистики, следуя технике, описанной в работе [193]. Подставляя выражения (4.4) в уравнение переноса излучения (4.1), мы получим

$$\begin{aligned} & \Omega \cdot \nabla \bar{I} + \Omega \cdot \nabla I' \\ &= -\sigma_{\text{ext}}^0 (\bar{I} + I') - \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} (\bar{f} \bar{I} + f' \bar{I} + \bar{f} I' + f' I') \\ &+ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 (\bar{I} + I') + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 (\bar{f} \bar{I} + f' \bar{I} + \bar{f} I' + f' I')] d\Omega' \\ &+ \frac{F_{\odot}}{4\pi} \left\{ \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \left[\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' \right] \right. \\ &\left. + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \left[\bar{f} \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + f' \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + \bar{f} (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' + f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Проведя процедуру статистического усреднения уравнения (4.5), приходим к следующему уравнению:

$$\begin{aligned} \Omega \cdot \nabla \bar{I} &= -\sigma_{\text{ext}}^0 \bar{I} - \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} (\bar{f} \bar{I} + \overline{f' I'}) \\ &+ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \bar{I} + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 (\bar{f} \bar{I} + \overline{f' I'})] d\Omega' \\ &+ \frac{F_{\odot}}{4\pi} \left\{ \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \left[\bar{f} \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + \overline{f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Уравнение для расчета ковариаций $\overline{f'^n I'}$ при $n \geq 1$ можно получить, вычитая (4.6) из (4.5):

$$\begin{aligned} \Omega \cdot \nabla I' &= -\sigma_{\text{ext}}^0 I' - \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} (f' \bar{I} - \overline{f' I'} + \bar{f} I' + f' I') \\ &+ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 I' + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 (f' \bar{I} - \overline{f' I'} + \bar{f} I' + f' I')] d\Omega' \\ &+ \frac{F_{\odot}}{4\pi} \left\{ \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' \right. \\ &\left. + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \left[f' \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} - \overline{f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'} + \bar{f} (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' + f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

¹Представление (4.4) схоже с декомпозицией Рейнольдса в гидродинамике.

Умножив (4.7) на f' и проведя процедуру статистического усреднения, получим

$$\begin{aligned}
\Omega \cdot \nabla \overline{f' I'} &= \overline{(\Omega \cdot \nabla f') I'} - \sigma_{\text{ext}}^0 \overline{f' I'} - \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \left(\overline{f'^2 I} + \overline{f f' I'} + \overline{f'^2 I'} \right) \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \left[\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \overline{f' I'} + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \left(\overline{f'^2 I} + \overline{f f' I'} + \overline{f'^2 I'} \right) \right] d\Omega' \\
&+ \frac{F_{\odot}}{4\pi} \left\{ \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \overline{f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } \right. \\
&\left. + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \left[\overline{f'^2 e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + \overline{f f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } + \overline{f'^2 (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } \right] \right\}. \tag{4.8}
\end{aligned}$$

Аналогично, умножив (4.7) на f^m , $n \geq 2$, после усреднения получим следующее уравнение:

$$\begin{aligned}
\Omega \cdot \nabla \overline{f^m I'} &= \overline{(\Omega \cdot \nabla f^m) I'} - \sigma_{\text{ext}}^0 \overline{f^m I'} - \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \left(\overline{f'^{(n+1)} I} - \overline{f^m f' I'} + \overline{f f^m I'} + \overline{f'^{(n+1)} I'} \right) \\
&+ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \left[\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \overline{f^m I'} + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \left(\overline{f'^{(n+1)} I} - \overline{f^m f' I'} + \overline{f f^m I'} + \overline{f'^{(n+1)} I'} \right) \right] d\Omega' \\
&+ \frac{F_{\odot}}{4\pi} \left\{ \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \overline{f^m (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } \right. \\
&\left. + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \left[\overline{f'^{(n+1)} e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} - \overline{f^m f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } + \overline{f f^m (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } + \overline{f'^{(n+1)} (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } \right] \right\}. \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Уравнение (4.9) для расчета $\overline{f^m I'}$ содержит \bar{I} , $\overline{f' I'}$, а также ковариации высокого порядка $\overline{(\Omega \cdot \nabla f^m) I'}$ и $\overline{f'^{(n+1)} I'}$. Из-за последних мы получаем бесконечную систему уравнений для \bar{I} и $\overline{f^m I'}$, $n \geq 1$, состоящую из уравнений (4.6) для $n = 0$, (4.8) для $n = 1$ и (4.9) для $n \geq 2$. На практике система должна быть оборвана на некоем уравнении n и далее замкнута с помощью предположений относительно $\overline{(\Omega \cdot \nabla f^m) I'}$ и $\overline{f'^{(n+1)} I'}$.

Тот же подход может быть использован для вывода граничных условий с подстилающей поверхностью для \bar{I} и $\overline{f^m I'}$, $n \geq 1$. В случае ламбертовской подложки с альбедо A , нижние граничные условия записываются в виде

$$\bar{I}_+ = \frac{A}{\pi} F_{\odot} |\mu_{\odot}| \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| \bar{I}_- d\Omega \tag{4.10}$$

и

$$\overline{f^m I'}_+ = \frac{A}{\pi} F_{\odot} |\mu_{\odot}| \overline{f^m (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } + \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| \overline{f^m I'}_- d\Omega, \tag{4.11}$$

где $\bar{I}_+ = \bar{I}(\mathbf{r}_s, \Omega_+)$, $\bar{I}_- = \bar{I}(\mathbf{r}_s, \Omega_-)$, $\overline{f^m I'}_+ = \overline{f^m I'}(\mathbf{r}_s, \Omega_+)$ и $\overline{f^m I'}_- = \overline{f^m I'}(\mathbf{r}_s, \Omega_-)$.

Для стохастической модели n -ого порядка определим вектор яркости из $(n+1)$ элементов как

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} \bar{I} \\ \overline{f' I'} \\ \vdots \\ \overline{f'^m I'} \end{bmatrix},$$

и через него представим уравнения (4.6), (4.8) и (4.9) в матричной форме:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) &= \mathbf{I}_{\nabla}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{r}) \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(\mathbf{r}) \triangle \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \\ &+ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [\mathbf{S}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}}(\mathbf{r}) P_1(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') \triangle \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}')] d\Omega' \\ &+ \frac{F_{\odot}}{4\pi} [\mathbf{S}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_{\odot}) \mathbf{T}_{\odot}(z) + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}}(\mathbf{r}) P_1(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_{\odot}) \triangle \mathbf{T}_{\odot}(\mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (4.12)$$

где вектор \mathbf{I}_{∇} , включающий в себя $\nabla f'^k$, $k = 1, \dots, n$, и вектор пропускания прямого солнечного излучения \mathbf{I}_{\odot} имеют вид

$$\mathbf{I}_{\nabla} = \begin{bmatrix} 0 \\ \overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f')} I' \\ \vdots \\ \overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f'^m)} I' \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad \mathbf{T}_{\odot} = \begin{bmatrix} \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} \\ \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'} \\ \vdots \\ \overline{f'^m(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'} \end{bmatrix},$$

соответственно. Матрица \mathbf{S} зависит от произведения коэффициента рассеяния на индикатрису рассеяния:

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \bar{f} P_1 & \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 & 0 & \dots & 0 \\ \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \overline{f'^2} P_1 & \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \bar{f} P_1 & \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \overline{f'^{(n+1)}} P_1 & -\sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \bar{f}^m P_1 & 0 & \dots & \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \bar{f} P_1 \end{bmatrix}. \quad (4.13)$$

Матрица экстинкции $\boldsymbol{\Sigma}$ имеет вид:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f} & \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} & 0 & \dots & 0 \\ \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \overline{f'^2} & \sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f} & \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \overline{f'^{(n+1)}} & -\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f}^m & 0 & \dots & \sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f} \end{bmatrix}. \quad (4.14)$$

Векторы ковариации высокого порядка $\Delta \mathbf{I}$ и $\Delta \mathbf{I}_\odot$ выражаются как

$$\Delta \mathbf{I} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \overline{f'^{(n+1)} I'} \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad \Delta \mathbf{I}_\odot = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \overline{f'^{(n+1)} (e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'} \end{bmatrix},$$

соответственно. Для того, чтобы решить уравнение переноса (4.12), мы должны добавить условия замыкания для $\overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f'^k) I'}$, $k = 1, \dots, n$, и $\overline{f'^{(n+1)} I'}$. Для замыкания $\overline{f'^{(n+1)} I'}$ существуют следующие варианты:

1. Стандартная процедура замыкания стохастической модели порядка n . Она заключается в пренебрежении $\overline{f'^{(n+1)} I'}$ по сравнению с \bar{I} , $\overline{f' I'}$, ..., $\overline{f'^n I'}$. Поэтому, предполагая, что $\overline{f'^{(n+1)} I'} = 0$, мы получим $\Delta \mathbf{I} = 0$. Кроме того, если

$$\overline{f'^{(n+1)} e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} - \overline{f'^n} \overline{f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'} + \overline{f} \overline{f'^n (e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'} \gg \overline{f'^{(n+1)} (e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'},$$

то можно также пренебречь $\Delta \mathbf{I}_\odot$.

2. Предположение гауссовой статистики. Процедура замыкания, предложенная в [193] в рамках стохастической модели второго порядка ($n = 2$), основана на соотношении между корреляционными моментами третьего и четвертого порядков для гауссовой статистики. Если флуктуации оптических свойств описываются гауссовой статистикой, то условие замыкания имеет вид

$$\overline{f'^3 I'} = 3 \overline{f'^2} \overline{f' I'}.$$

В результате такого допущения мы должны решить стохастическое уравнение (4.12) относительно \mathbf{I} с $\Delta \mathbf{I} = 0$, в котором элементы на позиции (3, 2) в матрицах \mathbf{S} и $\boldsymbol{\Sigma}$ вычисляются как

$$[\mathbf{S}]_{32} = 2\sigma_{\text{sct}}^{\text{1d}} P_1 \overline{f'^2},$$

$$[\boldsymbol{\Sigma}]_{32} = 2\sigma_{\text{ext}}^{\text{1d}} \overline{f'^2},$$

соответственно, третий элемент вектора $\Delta \mathbf{I}_\odot$ равен $[\Delta \mathbf{I}_\odot]_3 = \overline{f'^3 (e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'} - 3 \overline{f'^2} \overline{f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'}$.

Если та же процедура применяется к слагаемым от прямого солнечного излучения, что приводит к $\overline{f'^3 (e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'} = 3 \overline{f'^2} \overline{f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'}$, то $\Delta \mathbf{I}_\odot = 0$.

3. Модель разорванной облачности, в которой $f = f^2$, откуда следует условие замыкания для $\overline{f'^2 I'}$. Так, из равенства $f = f^2$ можно получить, что $\overline{f^2 I} = \overline{f I}$ и $\overline{f} = \overline{f^2} + \overline{f'^2}$. В результате

$$\overline{f'^2 I'} = (1 - 2\overline{f}) \overline{f' I'} \quad (4.15)$$

и по аналогии

$$\overline{f'^2 (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } = (1 - 2\overline{f}) \overline{f' (e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'}. \quad (4.16)$$

Относительно ковариаций высокого порядка $\overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f^k) I'}$, $k = 1, \dots, n$ заметим следующее:

1. В стохастической модели нулевого порядка (4.6) ковариационный вектор \mathbf{I}_{∇} не появляется. Поэтому необходимо только условие замыкания для $\overline{f' I'}$. В работе [329] авторы пренебрегли слагаемым $\overline{f' I'}$. В работе [330] было использовано условие замыкания $\overline{f' I'} = C \overline{f I}$, где $C = C(z, \mu) = \mu \tilde{C}(z)$ рассчитывается в рамках двухпоточкового приближения.
2. В работе [193] было пренебрежено ковариационным вектором \mathbf{I}_{∇} . Для анализа процесса переноса излучения через облачную атмосферу использовалась стохастическая модель второго порядка. Эта модель позволяет получить результаты с достаточной точностью, если величины $\overline{f'^2}$ и $\overline{f'^3}$ не превышают определенные критические значения.
3. В рамках модели разорванной облачности ковариационный вектор \mathbf{I}_{∇} является ключевым звеном в установлении эквивалентности исходной стохастической модели с моделью, основанной на уравнениях Levermore-Pomraning.

4.2.3 Стохастическая модель разорванной облачности

Используя условия замыкания (4.15) и (4.16) вместе с уравнениями (4.6) и (4.8), мы получаем стохастическую модель первого порядка для двумерного вектора $\mathbf{I} = [\overline{I}, \overline{f' I'}]^T$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = & \mathbf{I}_{\nabla}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - \boldsymbol{\Sigma}(\mathbf{r}) \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \mathbf{S}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega' \\ & + \frac{F_{\odot}}{4\pi} \mathbf{S}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_{\odot}) \mathbf{T}_{\odot}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4.17)$$

где $\mathbf{I}_\nabla = [0, \overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f') I'}]^T$, $\mathbf{T}_\odot = [e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}, \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'}]^T$,

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \bar{f} P_1 & \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \\ \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \bar{f}^2 P_1 & \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} (1 - \bar{f}) P_1 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

и

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f} & \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \\ \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f}^2 & \sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} (1 - \bar{f}) \end{bmatrix}. \quad (4.19)$$

Для стохастической модели первого порядка (4.17) граничные условия (4.10) и (4.11) приобретают вид

$$\mathbf{I}(\mathbf{r}_t, \boldsymbol{\Omega}_-) = 0 \quad (4.20)$$

и

$$\mathbf{I}(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}_+) = \frac{A}{\pi} F_\odot |\mu_\odot| \mathbf{T}_\odot(\mathbf{r}_s) + \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| \mathbf{I}(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}_-) d\Omega. \quad (4.21)$$

Уравнение (4.17) эквивалентно уравнениям Levermore-Pomraning, представленным в матричной форме и записанным через среднее значение функции яркости в облаке

$$I_1 = \frac{1}{\bar{f}} \bar{f} \bar{I} \quad (4.22)$$

и через среднее значение функции яркости в чистом небе

$$I_0 = \frac{1}{1 - \bar{f}} \overline{(1 - f) I}. \quad (4.23)$$

Действительно, беря линейную комбинацию двух уравнений (4.17) согласно правилам $\bar{f} I_1 = \bar{f} \bar{I} + \overline{f' I'}$ и $(1 - \bar{f}) I_0 = (1 - \bar{f}) \bar{I} - \overline{f' I'}$ и используя $\bar{f}^2 = \bar{f} - \bar{f}^2$ и $\overline{I' \nabla f'} = \overline{I \nabla f} - \bar{I} \nabla \bar{f}$, мы получаем стохастическое уравнение, аналогичное уравнению (4.17), но для вектора $\mathbf{I} = [\bar{f} I_1, (1 - \bar{f}) I_0]^T$, где $\mathbf{I}_\nabla = [\overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f) \bar{I}}, -\overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f) \bar{I}}]^T$, $\mathbf{T}_\odot = [f e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}, \overline{(1 - f) e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}}]^T$,

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 & 0 \\ 0 & \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \end{bmatrix} \text{ и } \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} & 0 \\ 0 & \sigma_{\text{ext}}^0 \end{bmatrix}. \quad (4.24)$$

Полученное уравнение является матричной формой уравнения Levermore-Pomraning для бинарных смесей, в котором связанные (*coupling*) слагаемые заключены в ковариационном векторе \mathbf{I}_∇ . Таким образом, в стохастической модели (4.17) вектор яркости содержит среднее значение яркости и значение ковариации яркости и функции-индикатора; а в стохастической

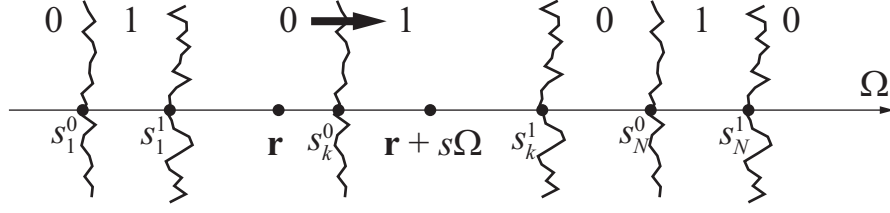


Рисунок 4.1 — Область, содержащая зоны с облаком, где $g(s) = 1$, и зоны без облака, где $g(s) = 0$.

модели, основанной на уравнениях Levermore-Pomraning, вектор яркости содержит средние значения функции яркости в каждом материале (применительно к рассматриваемой задаче — в облаке и чистом небе).

Основная проблема заключается в нахождении слагаемого $\overline{(\Omega \cdot \nabla f')} I'$, которое входит в выражение для \mathbf{I}_∇ . Далее мы рассмотрим равенство

$$\overline{(\Omega \cdot \nabla f')} I' = \overline{(\Omega \cdot \nabla f)} \bar{I} - (\Omega \cdot \nabla \bar{f}) \bar{I} \quad (4.25)$$

и найдем $\overline{(\Omega \cdot \nabla f)} \bar{I}$. В следующей части мы найдем $\overline{(\Omega \cdot \nabla f')} I'$. Отыскание $\overline{(\Omega \cdot \nabla f)} \bar{I}$ будет основано на предположениях, сходных с допущениями модели Levermore, позволяющими замкнуть систему уравнений. Будем считать, что значения функции яркости на границе между облаком и чистым небом равны усредненному по объему яркости (далее будут приведены более строгие определения). Приведенный вывод является альтернативой стандартного вывода, приведенного в работах [199, 203]. Его достоинство заключается в том, что он более понятный и его проще адаптировать к двумерному и одномерному случаям.

В точке \mathbf{r} мы проводим линию вдоль направления Ω . За s обозначим пространственную координату на этой линии. Таким образом, точка с координатой $\mathbf{r} + s\Omega$ это точка на этой линии, расположенная на расстоянии s от точки \mathbf{r} в направлении Ω , как показано на рисунке 4.1. Далее введем функцию g , равную 1 в облаке и 0 вне облака:

$$g(s) = f(\mathbf{r} + s\Omega) = \begin{cases} 1, & s_k^0 \leq s \leq s_k^1, \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, \quad (4.26)$$

где s_k^i , ($i = 0, 1$; $k = 1, \dots, N$) — значения s в точках на границе зоны k с облаком, а N — число зон с облаком. Считаем, что при движении в направлении Ω мы переходим из материала i в материал j , а запись $\mathbf{r} + s_k^i \Omega$ означает координату точки на границе $i \rightarrow j$. При этом s_k^i и N являются случайными переменными. Пространственная производная (градиент) от f может быть выражена как

$$(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f)(\mathbf{r}) = \frac{df}{ds}(\mathbf{r}) = g'(0),$$

где g' – производная от g . Принимая во внимание то, что

$$g'(s) = \sum_{k=1}^N [\delta(s - s_k^0) - \delta(s - s_k^1)], \quad (4.27)$$

и используя представление функции Дирака через предел

$$\delta(s - s^*) = \lim_{\Delta s \rightarrow 0_+} h_{\Delta s}(s, s^*) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta s}, & s \in [s^* - \frac{\Delta s}{2}, s^* + \frac{\Delta s}{2}] \\ 0, & \text{иначе} \end{cases},$$

мы находим, что

$$g'(s) = \lim_{\Delta s \rightarrow 0_+} \sum_{k=1}^N [h_{\Delta s}(s, s_k^0) - h_{\Delta s}(s, s_k^1)]. \quad (4.28)$$

Таким образом, в фиксированной точке $\mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}$ справедливо, что $g'(s) \neq 0$, если для достаточно малого Δs точка $\mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}$ лежит на границе; $g'(s) > 0$, если $\mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}$ лежит на границе $0 \rightarrow 1$ в направлении $\mathbf{\Omega}$, и $g'(s) < 0$, если $\mathbf{r} + s\mathbf{\Omega}$ лежит на границе $1 \rightarrow 0$ в направлении $\mathbf{\Omega}^2$. Следовательно, для $s = 0$ можно записать

$$\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f)I} = T_0 - T_1, \quad (4.29)$$

где T_i имеет вид:

$$T_i = \lim_{\Delta s \rightarrow 0_+} \overline{I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \frac{1}{\Delta s}}^i, \quad (4.30)$$

обозначение “ $\overline{}^i$ ” означает усреднение по всем реализациям, в которых точка \mathbf{r} принадлежит границе $i \rightarrow j$ в направлении $\mathbf{\Omega}$. Для этих реализаций мы аппроксимируем яркости $I(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ на границах $i \rightarrow j$, которые обозначим за $\mathcal{I}_i(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$, средними по объему функциями яркости $I_i(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$, рассчитанными по формулам (4.23) и (4.22), т.е.

$$\mathcal{I}_i(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = I_i(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}), \quad (4.31)$$

как показано на рисунке 4.2.

²При обсуждении этого вывода на семинарах в DLR, часто высказывалось замечание о том, что вместо фразы «лежит на границе» следовало бы употребить формулировку «находится в окрестности границы». Помня об этой неточности, мы всё же употребляем первую формулировку ради простоты изложения. Введение термина «окрестность» потребовало бы дополнительных допущений. При изложении на физическом уровне строгости такая детализация интуитивно понятных вещей была бы избыточной.

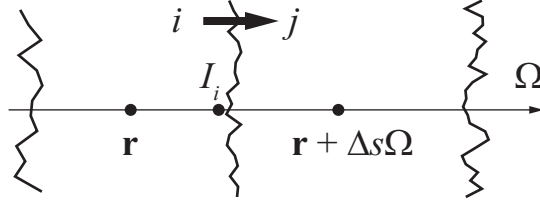


Рисунок 4.2 — Граница между областью i и областью j . Предполагается, что при движении из зоны i в зону j яркость на границе между зонами равна яркости, усредненной по области i .

Затем, для усреднения в (4.30) мы должны умножить $I_i(\mathbf{r}, \Omega)/\Delta s$ на вероятность соответствующих событий. Определим событие $A_i =$ «точка \mathbf{r} находится в материале i » и $B_j =$ «точка $\mathbf{r} + \Delta s\Omega$ находится в материале j ». Для $i \neq j$ вероятность наступления обоих событий A_i и B_j равна $P(A_i \cap B_j) = P(B_j | A_i)P(A_i)$, т.е. $P(A_i \cap B_j)$ – это вероятность того, что «точка \mathbf{r} находится в материале i и точка $\mathbf{r} + \Delta s\Omega$ находится в материале j », или в эквивалентной формулировке: «точка \mathbf{r} находится около границы $i \rightarrow j$ в направлении Ω ». Введем длину пропускания (*transition length*) $\lambda_i(\mathbf{r}, \Omega)$ в материале i в направлении Ω через условную вероятность того, что «точка $\mathbf{r} + \Delta s\Omega$ находится в материале j при условии, что точка \mathbf{r} находится в материале i », $P(B_j | A_i)$, через соотношение

$$P(B_j | A_i) = \frac{\Delta s}{\lambda_i(\mathbf{r}, \Omega)}. \quad (4.32)$$

С учетом того, что $P(A_0) = 1 - \bar{f}(\mathbf{r})$ и $P(A_1) = \bar{f}(\mathbf{r})$, мы получим

$$\overline{(\Omega \cdot \nabla f) I} = \frac{1 - \bar{f}}{\lambda_0} I_0 - \frac{\bar{f}}{\lambda_1} I_1. \quad (4.33)$$

В случае марковской статистики для облака, $\lambda_i(\mathbf{r}, \Omega)$ является марковской длиной пропускания; $\lambda_i(\mathbf{r}, \Omega)$ полностью определяются бинарными статистическими смесями. При произвольной статистике облака $\lambda_i(\mathbf{r}, \Omega)$ можно рассчитать через $P(B_j | A_i)$, или, точнее, через $P(A_i \cap B_j)$ и $P(A_i)$, для набора реализаций функции-индикатора f . Эквивалентный вывод уравнения (4.33), который больше похож на вывод из [199, 203], может быть сделан через определение оператора «градиент», который не связан с конкретной системой координат:

$$\Omega \cdot \nabla f = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{V} \oint_S (\Omega \cdot \mathbf{n}) f dS,$$

где S – поверхность, ограничивающая объем V , и \mathbf{n} – внешняя нормаль к поверхности S .

Чтобы рассчитать $\overline{(\Omega \cdot \nabla f) I}$ в случае одномерного или двумерного облака, рассмотрим общую ситуацию. Пусть \mathbf{e}_u и \mathbf{e}_v – это два ортонормальных вектора, таких что векторы Ω ,

\mathbf{e}_u и \mathbf{e}_v являются компланарными и $\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{e}_u > 0$. Представление $\boldsymbol{\Omega} = \Omega_u \mathbf{e}_u + \Omega_v \mathbf{e}_v$ приводит к $s\boldsymbol{\Omega} = u\mathbf{e}_u + v\mathbf{e}_v$, где $\Omega_u = \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{e}_u > 0$, $\Omega_v = \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{e}_v$, $u = \Omega_u s$, и $v = \Omega_v s$. Очевидно, u и v являются пространственными координатами в направлениях \mathbf{e}_u и \mathbf{e}_v , соответственно. Теперь предположим, что f не зависит от v . В результате $f(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}) = f(\mathbf{r} + u\mathbf{e}_u)$. Определяя функцию h как $h(u) = f(\mathbf{r} + u\mathbf{e}_u)$, с учетом (4.26), т.е. $g(s) = f(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega})$, мы получим $g(s) = h(u) = h(u(s))$ при $g'(s) = \Omega_u h'(u)$. Прямыми вычислениями можно получить выражение для h :

$$h(u) = \begin{cases} 1, & u_k^0 \leq u \leq u_k^1 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases},$$

и далее для g' ,

$$g'(s(u)) = \Omega_u \sum_{k=1}^N [\delta(u - u_k^0) - \delta(u - u_k^1)].$$

Положим $u_k^i = \Omega_u s_k^i$, так что $\mathbf{r} + u_k^i \mathbf{e}_u$ являются точками на границах $i \rightarrow j$ в направлении \mathbf{e}_u . Заметим, что этот результат можно было получить сразу из уравнения (4.27) и свойства функции Дирака $\delta(ax) = (1/|a|)\delta(x)$. С учетом предыдущих аргументов мы приходим к итоговому выражению для $\overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f) I}$:

$$\overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f) I} = \Omega_u \left(\frac{1 - \bar{f}}{\lambda_{u0}} I_0 - \frac{\bar{f}}{\lambda_{u1}} I_1 \right), \quad (4.34)$$

где $\lambda_{ui}(\mathbf{r}, \mathbf{e}_u)$ – длина пропускания материала i в направлении \mathbf{e}_u . Альтернативный вывод выражения (4.34) можно сделать следующим образом: из $f(\mathbf{r} + s\boldsymbol{\Omega}) = f(\mathbf{r} + u\mathbf{e}_u)$ следует, что вероятность того, что «точка $\mathbf{r} + \Delta s\boldsymbol{\Omega}$ находится в материале j при том, что точка \mathbf{r} находится в материале i » равна вероятности того, что «точка $\mathbf{r} + \Delta u\mathbf{e}_u$ находится в материале j при том, что точка \mathbf{r} находится в материале i ». Таким образом, можно записать

$$P(B_j | A_i) = \frac{\Delta s}{\lambda_i} = \frac{\Delta u}{\lambda_{ui}},$$

при $\lambda_i = \lambda_{ui}/\Omega_u$. Этот результат вместе с (4.33) приводит к (4.34). Следует отметить, что выбор вектора \mathbf{e}_u при условии $\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{e}_u > 0$ можно сделать всегда. Вообще, для положительных и отрицательных значений $\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{e}_u$ выражение (4.34) остается справедливым, если заменить Ω_u на $|\Omega_u|$, а за λ_{ui} обозначить длину пропускания в материале i в направлении $\text{sign}(\Omega_u)\mathbf{e}_u$. Результат (4.34) может быть сведен к одномерным и двумерным облакам следующим образом:

1. Двухмерное облако однородно по высоте; его распределение описывается функцией $f(\mathbf{r}) = f(x, y)$. Для направления $\mathbf{\Omega} = (\theta, \varphi)$ рассмотрим разложение $\mathbf{\Omega} = \Omega_\rho \mathbf{e}_\rho + \Omega_z \mathbf{e}_z$, где \mathbf{e}_ρ – полярный единичный вектор в плоскости xy , \mathbf{e}_z – декартов единичный вектор вдоль оси z , $\Omega_\rho = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{e}_\rho = \sin \theta$, и $\Omega_z = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{e}_z = \cos \theta$. Так как f не зависит от z , выражение (4.34) остается справедливым при $\Omega_u = \Omega_\rho = \sin \theta$.
2. Одномерная модель облака применяется при двумерной модели среды; распределение облака описывается функцией $f(\mathbf{r}) = f(x)$. Для направления $\mathbf{\Omega} = (\theta, \varphi)$ рассмотрим разложение $\mathbf{\Omega} = \Omega_x \mathbf{e}_x + \Omega_{yz} \mathbf{e}_{yz}$, где \mathbf{e}_x – единичный вектор вдоль оси x , выбранный таким образом, что $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{e}_x > 0$, \mathbf{e}_{yz} – единичный вектор в плоскости yz , $\Omega_x = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{e}_x = \sin \theta |\cos \varphi|$, и $\Omega_{yz} = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{e}_{yz}$. Так как f не зависит от y и z , выражение (4.34) справедливо при $\Omega_u = \Omega_x = \sin \theta |\cos \varphi|$.

4.2.4 Стохастическая модель однородной трехмерной, двухмерной и одномерной разорванной облачности

Рассмотрим метод решения краевой задачи, состоящей из уравнений (4.17), (4.20) и (4.21). Для упрощения анализа мы подразумеваем горизонтальную инвариантность статистики облака, т.е. функция-индикатор f не зависит от x и y . Тогда

$$\bar{f} = \bar{f}(z), \quad \overline{f'^2} = \overline{f'^2}(z), \quad \text{и} \quad \lambda_i = \lambda_i(z, \mu). \quad (4.35)$$

Также предположим, что детерминистические оптические параметры облака и чистого неба зависят только от высоты, т.е. $\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} = \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(z)$ и $\sigma_{\text{ext}}^0 = \sigma_{\text{ext}}^0(z)$. В качестве возможной зависимости $\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(z)$ можно взять следующую:

$$\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(z) = \begin{cases} \sigma_c, & h_1 \leq z \leq h_2 \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}, \quad (4.36)$$

где h_1 и h_2 – вертикальные координаты нижней и верхней границ облака, соответственно. Из этих предположений следует, что $\Sigma = \Sigma(z)$, $\mathbf{S} = \mathbf{S}(z, \mathbf{\Omega}, \mathbf{\Omega}')$ и $\mathbf{I}_\odot = \mathbf{I}_\odot(z)$. Принимая во внимание граничные условия (4.20) и (4.21), можно утверждать, что усредненные значения яркости также не зависят от x и y , т.е. $\mathbf{I} = \mathbf{I}(z, \mathbf{\Omega})$, а оператор $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla$ в (4.17) преобразуется в $\mu d/dz$.

Допущение о горизонтальной инвариантности (4.35) для случая однородной статистики облака приводит к соотношениям:

$$\nabla \bar{f} = 0, \nabla \bar{f'^2} = 0 \text{ и } \lambda_i = \lambda_i(\mu). \quad (4.37)$$

Для статистически однородного облака параметр λ_i имеет смысл средней длины хорды в материале i в направлении $\mathbf{\Omega}$, а параметр облачности \bar{f} может быть посчитан как

$$\bar{f} = \frac{\lambda_1(\mu)}{\lambda_0(\mu) + \lambda_1(\mu)}. \quad (4.38)$$

Из (4.38) становится понятно, что \bar{f} не зависит от μ , когда $\lambda_0(\mu)$ и $\lambda_1(\mu)$ одинаково зависят от μ . Пример стохастической модели облака, в которой справедливо условие (4.37) и облако описывается параметром облачности \bar{f} и средним соотношением сторон $\gamma = l/h$, где h и l – характерные вертикальный и горизонтальный размеры облака, соответственно, описан в работе [206]. Длина корреляции λ_c в случае однородной статистики определяется как

$$\frac{1}{\lambda_c} = \frac{1}{\lambda_0} + \frac{1}{\lambda_1}. \quad (4.39)$$

Возвращаясь к проблеме отыскания $\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f')I'}$, заметим, что для однородной статистики $\nabla \bar{f} = 0$. Тогда из (4.25) следует, что $\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f')I'} = \overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f)I}$. С учетом (4.33), (4.22) и (4.23) можно получить, что

$$\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f')I'} = -\frac{1}{\lambda_c} \bar{f}' \bar{I}. \quad (4.40)$$

Докажем последнее равенство. Для этого рассмотрим (4.33) и подставим в него (4.22) и (4.23):

$$\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f)I} = \frac{1 - \bar{f}}{\lambda_0} I_0 - \frac{\bar{f}}{\lambda_1} I_1 = \frac{\overline{(1 - f)I}}{\lambda_0} - \frac{\bar{f} \bar{I}}{\lambda_1}.$$

С учетом (4.39) последнее равенство можно переписать как

$$\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f)I} = \frac{\bar{I}}{\lambda_0} - \frac{\bar{f} \bar{I}}{\lambda_c}.$$

Используя равенство $\bar{f} \bar{I} = \bar{f}' \bar{I}' + \overline{f' I'}$, получим

$$\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f)I} = \frac{\bar{I}}{\lambda_0} - \frac{\bar{f} \bar{I}}{\lambda_c} - \frac{\overline{f' I'}}{\lambda_c}.$$

Из (4.38) и (4.39) следует, что

$$\frac{\bar{I}}{\lambda_0} = \frac{\bar{f}\bar{I}}{\lambda_c}.$$

Следовательно, $\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f) I} = -\frac{\overline{f' I'}}{\lambda_c}.$

Q.E.D.

Для облака с однородными и изотропными статистическими свойствами можно записать

$$\nabla \bar{f} = 0, \nabla \bar{f'^2} = 0, \text{ и } \lambda_i = \text{const.} \quad (4.41)$$

Очевидно, что для двумерного и одномерного облаков, для которых $f = f(x, y)$ и $f = f(x)$, соответственно, предположение о горизонтальной инвариантности (4.35) означает также предположение об однородности и изотропности (4.41). Поэтому для двухмерного облака из (4.34) следует, что

$$\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f') I'} = -\frac{\sin \theta}{\lambda_c} \overline{f' I'}. \quad (4.42)$$

Для одномерного облака выражение (4.34) приводит к равенству

$$\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f') I'} = -\frac{\sin \theta |\cos \varphi|}{\lambda_c} \overline{f' I'}. \quad (4.43)$$

Выражения (4.40), (4.42) и (4.43) основаны на гипотезе замыкания (4.31) модели Levermore. Равенство значений яркости на границе и в объеме является точной для облаков с марковской статистикой. В случае облаков с немарковской статистикой это равенство, строго говоря, не выполняется (даже без рассеяния). Однако точность можно повысить с помощью замены длины корреляции λ_c в (4.40), (4.42) и (4.43) на эффективную длину корреляции λ_{eff} [198]. Эффективная длина корреляции рассчитывается как $\lambda_{\text{eff}} = \lambda_c/q$, где поправочный коэффициент q зависит от детерминистических коэффициентов экстинкции облака и чистого неба, а также от статистики облака. Компактно выражения (4.40), (4.42) и (4.43) могут быть представлены как

$$\overline{(\mathbf{\Omega} \cdot \nabla f') I'} = -F(\mathbf{\Omega}) \frac{q}{\lambda_c} \overline{f' I'}, \quad (4.44)$$

где F – угловой фактор, зависящий от направления $\mathbf{\Omega} = (\theta, \varphi)$. Для трехмерного облака $F(\mathbf{\Omega}) = 1$ и $\lambda_c = \lambda_c(\mu)$, для двухмерного облака $F(\mathbf{\Omega}) = \sin \theta$ и $\lambda_c = \text{const}$, для одномерного облака $F(\mathbf{\Omega}) = \sin \theta |\cos \varphi|$ и $\lambda_c = \text{const}$.

Расчет в случае одномерного облака является наиболее трудоемкой задачей, так как F зависит не только от зенитного угла θ , но также и от азимутального угла φ . Так как

разложение в ряд Фурье функции $|\cos \varphi|$ содержит синусы и косинусы, Фурье-разложение по азимуту вектора яркости \mathbf{I} также будет содержать синусы и косинусы. Для упрощения расчета воспользуемся приближенным соотношением $|\cos \varphi| \approx \cos^2 \varphi$. Это приближенное равенство выполняется с точность 20 процентов по норме L_2 на отрезке $[0, 2\pi]^3$, что для этих расчетов приемлемо. С учетом этого мы представим $\overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f') I'}$ в виде

$$\overline{(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla f') I'} = -\sin \theta \frac{q}{\lambda_c} \overline{f' I'} + \sin \theta (1 - \cos^2 \varphi) \frac{q}{\lambda_c} \overline{f' I'} \quad (4.45)$$

и перепишем стохастическое уравнение (4.17) как

$$\begin{aligned} \mu \frac{d\mathbf{I}}{dz}(z, \boldsymbol{\Omega}) = & -\boldsymbol{\Sigma}_q(\mu, z) \mathbf{I}(z, \boldsymbol{\Omega}) + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \mathbf{S}(z, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') \mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega' \\ & + \frac{F_\odot}{4\pi} \mathbf{S}(z, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_\odot) \mathbf{T}_\odot(z) + \sqrt{1 - \mu^2} (1 - \cos^2 \varphi) \frac{q}{\lambda_c} \mathbf{I}'(z, \boldsymbol{\Omega}), \end{aligned} \quad (4.46)$$

где поправочный вектор $\mathbf{I}' = [0, \overline{f' I'}]^T$ и новая матрица экстинкции $\boldsymbol{\Sigma}_q$ имеет вид

$$\boldsymbol{\Sigma}_q(\mu, z) = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{ext}}^0(z) + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(z) \bar{f} & \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(z) \\ \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(z) \bar{f}^2 & \sigma_{\text{ext}}^0(z) + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(z) (1 - \bar{f}) + \sqrt{1 - \mu^2} \frac{q}{\lambda_c} \end{bmatrix}.$$

Стохастическое уравнение (4.46) описывает наиболее сложный случай (одномерную статистику облака). Следующие случаи могут быть получены из (4.46) как частные:

1. стохастическая модель для трехмерной статистики облака, положив $\mathbf{I}' = 0$, $\boldsymbol{\Sigma}_q = \boldsymbol{\Sigma}_q(\mu = 0, z)$ и $\lambda_c = \lambda_c(\mu)$.
2. стохастическая модель для двумерной статистики облака, положив $\mathbf{I}' = 0$.
3. стохастическая модель, в которой пренебрегается ковариационным вектором \mathbf{I}_∇ , зависящим от $\nabla f'$, положив $\mathbf{I}' = 0$ и $\boldsymbol{\Sigma}_q = \boldsymbol{\Sigma}_q(\mu = 1, z)$ (или $q = 0$, что эквивалентно).
4. однородный случай (только облако или только чистое небо), положив $q = 0$ и $\bar{f}^2 = 0$ в выражениях для \mathbf{S} и $\boldsymbol{\Sigma}_0$, а также $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'} = 0$ в выражении для \mathbf{I}_\odot . При этом $\bar{f} = 1$ для случая облака и $\bar{f} = 0$ для случая чистого неба.

Уравнение (4.46) является одномерной стохастической моделью, в которой стохастические свойства облака задаются через стохастические параметры объема среды \bar{f} , \bar{f}^2 и λ_i , $i = 0, 1$, и

³То есть, $\left(\sqrt{\int_0^{2\pi} |\cos \varphi|^2 d\varphi} - \sqrt{\int_0^{2\pi} (\cos^2 \varphi)^2 d\varphi} \right) / \sqrt{\int_0^{2\pi} (\cos^2 \varphi)^2 d\varphi} < 0.2$.

через стохастические параметры коэффициента пропускания прямого солнечного излучения $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$ и $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'}$. Соответствующие параметры для произвольной модели облака могут быть определены с помощью численного осреднения по ансамблю реализаций функции-индикатора f .

Для одномерного облака стохастическое уравнение переноса (4.46) решается итерационно: вначале поправочный вектор равен нулю $\mathbf{I}'^{(0)} = 0$, вектор яркости $\mathbf{I}^{(n)}$ на шаге итерации n рассчитывается через вектор $\mathbf{I}'^{(n-1)}$, найденный на предыдущей итерации. Отметим два обстоятельства:

1. Так как $\overline{f'I'} \ll \bar{I}$, поправочный вектор \mathbf{I}' много меньше вектора \mathbf{I} . Однако в модели Levermore, сформулированной для $\mathbf{I} = [\bar{f}I_1, (1 - \bar{f})I_0]^T$, это не так.
2. Из (4.45) следует, что вектор \mathbf{I} на первом шаге итерации (т.е. $\mathbf{I}^{(1)}$) является решением стохастической двумерной модели облака (потому что на первом шаге итерации $\mathbf{I}' = 0$).

Насчет вектора пропускания прямого солнечного излучения заметим:

1. Стохастическая модель (4.46) сформулирована через диффузную часть излучения и основана на предположении о том, что вектор $\mathbf{T}_{\odot} = [\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}, \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'}]$ известен. Точнее, мы предполагаем, что у нас есть стохастическая модель облака, в которой вектор \mathbf{T}_{\odot} рассчитывается с помощью численного усреднения.
2. Функция яркости от прямого солнечного излучения в стохастическом уравнении переноса (4.46) равна $\mathbf{I}_{\odot q}(z) = F_{\odot} \delta(\mu + \mu_{\odot}) \delta(\varphi - \varphi_{\odot}) \mathbf{T}_{\odot q}(z)$, где вектор пропускания $\mathbf{T}_{\odot q}$ является решением граничной задачи для полубесконечной среды, состоящей из стохастического уравнения переноса

$$-\mu_{\odot} \frac{d\mathbf{T}_{\odot q}}{dz}(z) = -\Sigma_{\odot q}(z) \mathbf{T}_{\odot q}(z), \quad (4.47)$$

где

$$\Sigma_{\odot q} = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f} & \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \\ \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f}^2 & \sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} (1 - \bar{f}) + \sqrt{1 - \mu_{\odot}^2} |\cos \varphi_{\odot}| \frac{q}{\lambda_c} \end{bmatrix},$$

и граничного условия на верхней границе атмосферы $\mathbf{T}_{\odot q}(z_t) = [1, 0]^T$. Заметим, что для $\varphi_{\odot} = 0$: $\Sigma_{\odot q} = \Sigma_q$.

Для стохастической модели, сформулированной через полную яркость, диффузионная часть является решением уравнения (4.46), в котором \mathbf{I}_{\odot} заменен на $\mathbf{I}_{\odot q}$. Очевидно, если q плохо

подобран, то ошибки в $\mathbf{I}_{\odot q}$ приведут к ошибкам в \mathbf{I} . Тем не менее, решение стохастического уравнения переноса (4.47), зависящее от параметра q , может быть использовано для определения оптимального значения q_0 :

$$q_0 = \arg \min_q \left\| [\mathbf{T}_{\odot}]_1 - [\mathbf{T}_{\odot q}]_1 \right\|_{2z}, \quad (4.48)$$

где $\|\cdot\|_{2z}$ — L_2 -норма на интервале оси вертикальной координаты, запись $[\mathbf{T}_{\odot}]_1$ обозначает первый элемент вектора \mathbf{T}_{\odot} . В таком контексте параметр q_0 выступает в роли поправки для предположения (условия замыкания) (4.31) для яркости прямого солнечного излучения (в отсутствии рассеяния), а не для диффузной части яркости (когда рассеяние есть). Таким образом, q_0 уменьшает ошибку предположения (4.31) для немарковской статистики облака, но не для рассеивающих сред. Анализ влияния q_0 на решение будет проведен в разделе 4.3.

В случае неоднородной статистики облака, в частности при вертикальных изменениях статистических характеристик облака, как в (4.35), предпочтительней использовать уравнения Levermore-Ромганинг. Учитывая (4.33), нетрудно убедиться, что эти уравнения могут быть представлены в матричной форме как в (4.46), где \mathbf{S} имеет вид как в (4.24), $\mathbf{I}' = 0$ и

$$\Sigma_q(\mu, z) = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{ext}}^0(z) + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}(z) + \frac{q}{\lambda_1(z, \mu)} & -\frac{q}{\lambda_0(z, \mu)} \\ -\frac{q}{\lambda_1(z, \mu)} & \sigma_{\text{ext}}^0(z) + \frac{q}{\lambda_0(z, \mu)} \end{bmatrix}.$$

Таким образом, стохастическое уравнение (4.46) в своей общей форме описывает однородные и неоднородные случаи статистики облака. Следующий раздел будет посвящен описанию численного метода решения такого типа уравнения переноса.

4.2.5 Решение с помощью метода дискретных ординат

Стохастическое уравнение (4.46) будем решать в рамках метода дискретных ординат с матричной экспонентой [243]. Положим $\varphi_{\odot} = 0$ и разложим вектор яркости и псевдофазовую матрицу в ряд Фурье по косинусам азимутального угла φ :

$$\mathbf{I}(z, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{m \geq 0} \mathbf{I}_m(z, \mu) \cos m\varphi,$$

$$\mathbf{S}(z, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') = \sum_{m \geq 0} (2 - \delta_{m0}) \mathbf{S}_m(z, \mu, \mu') \cos [m(\varphi - \varphi')].$$

Матрица \mathbf{S}_m раскладывается в ряд по присоединенным полиномам Лежандра

$$\mathbf{S}_m(z, \mu, \mu') = \sum_{n \geq m} \mathbf{\Pi}_n(z) P_n^m(\mu) P_n^m(\mu'),$$

где

$$\mathbf{\Pi}_n = \begin{bmatrix} \sigma_{\text{sct}}^0 \chi_n^0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \bar{f} \chi_n^1 & \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \chi_n^1 \\ \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} \bar{f}^2 \chi_n^1 & \sigma_{\text{sct}}^0 \chi_n^0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} (1 - \bar{f}) \chi_n^1 \end{bmatrix},$$

а χ_n^0 и χ_n^1 – коэффициенты разложения индикатрис Релея и Ми по нормированным полиномам Лежандра, соответственно.

Стохастическое уравнение для азимутальной гармоники m запишется в виде

$$\begin{aligned} \mu \frac{d\mathbf{I}_m}{dz}(z, \mu) = & -\mathbf{\Sigma}_q(\mu, z) \mathbf{I}_m(z, \mu) + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{S}_m(z, \mu, \mu') \mathbf{I}_m(z, \mu) d\Omega' \\ & + \frac{F_0}{4\pi} (2 - \delta_{m0}) \mathbf{S}_m(z, \mu, -\mu_{\odot}) \mathbf{I}_{\odot}(z) \\ & + \sqrt{1 - \mu^2} \frac{q}{2\lambda_c} [\alpha_m \mathbf{I}'_m(z, \mu) - \beta_m \mathbf{I}'_{m-2}(z, \mu) - \gamma_m \mathbf{I}'_{m+2}(z, \mu)], \end{aligned} \quad (4.49)$$

где $\alpha_1 = 1/2$ и $\alpha_m = 1$ при $m \neq 1$, $\beta_0 = \beta_1 = 0$, $\beta_2 = 1$ и $\beta_m = 1/2$ при $m \geq 3$, и $\gamma_m = 1/2$ при $m \geq 0$. Пусть $\{\mu_k, w_k\}_{k=1, \overline{N_{\text{do}}}}$ – множество ординат и весов гауссовой квадратурной схемы на интервале $(0, 1)$, где N_{do} – число дискретных ординат в полусфере. Введем вектор $\mathbf{i}_m(z) = [\mathbf{i}_m^1(z)^T, \mathbf{i}_m^2(z)^T]^T$ длины $4N_{\text{do}}$, где

$$\mathbf{i}_m^i(z) = \left[[\mathbf{i}_m^i(z)]_1^T, \dots, [\mathbf{i}_m^i(z)]_{N_{\text{do}}}^T \right]^T, \quad i = 1, 2, \quad (4.50)$$

$[\mathbf{i}_m^1(z)]_k = \mathbf{I}_m(z, \mu_k)$ и $[\mathbf{i}_m^2(z)]_k = \mathbf{I}_m(z, -\mu_k)$ для $k = 1, \dots, N_{\text{do}}$. Стохастическое уравнение (4.49) в пространстве дискретных ординат может быть записано как

$$\frac{d\mathbf{i}_m}{dz}(z) = \mathbf{A}_m(z) \mathbf{i}_m(z) + \mathbf{b}_m(z) + \triangle \mathbf{b}_m(z). \quad (4.51)$$

Матрица \mathbf{A}_m размерности $4N_{\text{do}} \times 4N_{\text{do}}$ имеет вид

$$\mathbf{A}_m(z) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_m^{11}(z) & \mathbf{A}_m^{12}(z) \\ \mathbf{A}_m^{21}(z) & \mathbf{A}_m^{22}(z) \end{bmatrix},$$

где элементы матрицы \mathbf{A}_m^{ij} , $i, j = 1, 2$ размерности $2N_{\text{до}} \times 2N_{\text{до}}$ рассчитываются как

$$\begin{aligned} [\mathbf{A}_m^{11}(z)]_{kl} &= \frac{1}{2\mu_k} [w_l \mathbf{S}_m(z, \mu_k, \mu_l) - 2\mathbf{\Sigma}_q(\mu_k, z) \delta_{kl}], \\ [\mathbf{A}_m^{12}(z)]_{kl} &= \frac{1}{2\mu_k} w_l \mathbf{S}_m(z, \mu_k, -\mu_l), \\ [\mathbf{A}_m^{21}(z)]_{kl} &= -\frac{1}{2\mu_k} w_l \mathbf{S}_m(z, -\mu_k, \mu_l), \\ [\mathbf{A}_m^{22}(z)]_{kl} &= -\frac{1}{2\mu_k} [w_l \mathbf{S}_m(z, -\mu_k, -\mu_l) - 2\mathbf{\Sigma}_q(-\mu_k, z) \delta_{kl}] \end{aligned} \quad (4.52)$$

для $k, l = 1, \dots, N_{\text{до}}$. Вектор источника \mathbf{b}_m длины $4N_{\text{до}}$ имеет вид

$$\mathbf{b}_m(z) = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_m^1(z) \\ \mathbf{b}_m^2(z) \end{bmatrix},$$

где, как и в (4.50), компоненты вектора \mathbf{b}_m^i , $i = 1, 2$ длины $2N_{\text{до}}$ выражаются как

$$\begin{aligned} [\mathbf{b}_m^1(z)]_k &= \frac{1}{\mu_k} \frac{F_\odot}{4\pi} (2 - \delta_{m0}) \mathbf{S}_m(z, \mu_k, -\mu_\odot) \mathbf{I}_\odot(z), \\ [\mathbf{b}_m^2(z)]_k &= -\frac{1}{\mu_k} \frac{F_\odot}{4\pi} (2 - \delta_{m0}) \mathbf{S}_m(z, -\mu_k, -\mu_\odot) \mathbf{I}_\odot(z) \end{aligned} \quad (4.53)$$

для $k = 1, \dots, N_{\text{до}}$. Поправочный вектор $\Delta \mathbf{b}_m$ длины $4N_{\text{до}}$ может быть выражен как

$$\Delta \mathbf{b}_m(z) = \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{b}_m^1(z) \\ \Delta \mathbf{b}_m^2(z) \end{bmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} [\Delta \mathbf{b}_m^1(z)]_k &= \frac{1}{\mu_k} \sqrt{1 - \mu_k^2} \frac{q}{2\lambda_c} [\alpha_m \mathbf{i}_m^{\prime 1}(z) - \beta_m \mathbf{i}_{m-2}^{\prime 1}(z) - \gamma_m \mathbf{i}_{m+2}^{\prime 1}(z)], \\ [\Delta \mathbf{b}_m^2(z)]_k &= -\frac{1}{\mu_k} \sqrt{1 - \mu_k^2} \frac{q}{2\lambda_c} [\alpha_m \mathbf{i}_m^{\prime 2}(z) - \beta_m \mathbf{i}_{m-2}^{\prime 2}(z) - \gamma_m \mathbf{i}_{m+2}^{\prime 2}(z)] \end{aligned} \quad (4.54)$$

и $\mathbf{i}_m'(z) = [\mathbf{i}_m^{\prime 1}(z)^T, \mathbf{i}_m^{\prime 2}(z)^T]^T$, где $[\mathbf{i}_m^{\prime 1}(z)]_k = \mathbf{I}_m'(z, \mu_k)$ и $[\mathbf{i}_m^{\prime 2}(z)]_k = \mathbf{I}_m'(z, -\mu_k)$ для $k = 1, \dots, N_{\text{до}}$.

Граничное условие записывается в виде

$$[\mathbf{J}_{2N_{\text{до}}}, \mathbf{R}_m] \mathbf{i}_m(z_s) = \mathbf{r}_m(z_s),$$

где \mathfrak{J}_n – единичная матрица размерности $n \times n$, $[\mathbf{R}_m]_{kl} = -2Aw_l\mu_l\mathfrak{J}_2\delta_{m0}$, $k, l = 1, \dots, N_{\text{до}}$ – матрица отражения и $[\mathbf{r}_m]_k = (A/\pi) F_{\odot} |\mu_{\odot}| \mathbf{I}_{\odot}(z_s) \delta_{m0}$, $k = 1, \dots, N_{\text{до}}$ – вектор отражения.

Далее атмосфера разбивается на несколько однородных слоев, в каждом из которых решается дискретное уравнение (4.51) через матричную экспоненту. В целом, алгоритм решения полностью соответствует уже описанному алгоритму для плоской задачи (см. часть 2.2.4). Ниже мы отметим особенности реализации алгоритма:

1. Статистические параметры \bar{f} , $\overline{f'^2}$ и λ_i , $i = 0, 1$ для объема среды рассчитываются вместе со статистикой коэффициента пропускания прямого излучения $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$ и $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'}$ с помощью численного усреднения по ансамблю и пространству.
2. Уравнение (4.51) решается итерационно. Алгоритм включает в себя следующие шаги: (а) положим $\Delta \mathbf{b}_m^{(0)} = 0$; (б) для $n = 1, 2, \dots$ вычислим вектор яркости $\mathbf{i}_m^{(n)}$ для поправочного вектора $\Delta \mathbf{b}_m^{(n-1)}$ по значениям $\mathbf{i}_m'^{(n-1)}$, $\mathbf{i}_{m-2}'^{(n-1)}$ и $\mathbf{i}_{m+2}'^{(n-1)}$. (в) если выполняется условие сходимости для $\mathbf{i}_m^{(n)}$, то итерационный процесс останавливается.
3. Из симметрии присоединенных полиномов Лежандра

$$P_n^m(-\mu_k) = (-1)^{n-m} P_n^m(\mu_k)$$

следует, что $\mathbf{S}_m(z, -\mu_k, -\mu_l) = \mathbf{S}_m(z, \mu_k, \mu_l)$ и $\mathbf{S}_m(z, -\mu_k, \mu_l) = \mathbf{S}_m(z, \mu_k, -\mu_l)$. С учетом $\Sigma_q(-\mu_k, z) = \Sigma_q(\mu_k, z)$ получаем, что $\mathbf{A}_m^{22}(z) = -\mathbf{A}_m^{11}(z)$ и $\mathbf{A}_m^{21}(z) = -\mathbf{A}_m^{12}(z)$. Поэтому спектральная декомпозиция матрицы \mathbf{A} осуществляется с учетом её симметрии.

4. Средние значения яркости для произвольной геометрии зондирования определяются с помощью интегрирования стохастического уравнения нулевого порядка (4.6) на шаге пост-обработки. Для упрощения вычислений значение $\overline{f'I'}$ для заданной геометрии зондирования определяется с помощью интерполяции значений $\overline{f'I'}$ кубическим сплайном.

4.3 Верификация стохастической модели

4.3.1 Модель облака

Численный анализ разработанного подхода мы проведем на примере одномерной модели разорванной облачности. Верхняя граница атмосферы расположена на высоте $h = 2$ км. Атмосфера содержит озон. Параметры рассеяния облачного слоя такие же, как в параграфе 2.2.5. Распределение коэффициента экстинкции соответствует (4.36) с $\sigma_c = 8 \text{ км}^{-1}$. Облачный

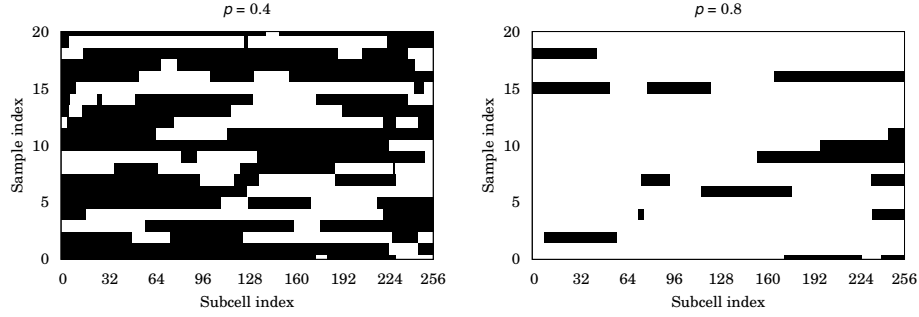


Рисунок 4.3 — Индикатор-функция $f_i = f(i\Delta x)$, $i = 1, \dots, 256$, при $p = 0.4$ и $p = 0.8$ для 20 реализаций: белые и черные области соответствуют облаку и чистому небу, соответственно.

слой размещен между уровнями $h_1 = 0.5$ км и $h_2 = 1.5$ км. Таким образом, оптическая толщина облака равна 8. Расчеты выполнены для единичного солнечного потока и альбедо поверхности 0.2.

Стохастические алгоритмы моделирования облака построены на генераторе случайных чисел. Ключевым параметром, описывающим структуру облака, является вероятность заполнения p . Рассматриваемый домен делится на N ячеек. В каждой ячейке с вероятностью, равной параметру облачности, содержится облако. Однако при такой дискретизации распределение облачных «кластеров» по размерам не будет монотонным. Чтобы приблизить модель к реальной, в работе [331] предложено делить каждую ячейку, содержащую облако, на M субъячеек длиной Δx , каждая из которых содержит облако с вероятностью $p^{1/M}$. Средняя вероятность заполнения исходной ячейки облаком не меняется и равна p . В таком алгоритме параметр облачности и вероятность заполнения численно не равны друг другу. Теоретическое значение параметра облачности не зависит от размера расчетной области и равен

$$\bar{f}_{\text{th}} = \frac{\ln(1-p)}{\ln p + \ln(1-p)}.$$

В представленных далее расчетах $N = 4$, $M = 64$ и $\Delta x = 0.025$ км. Длина расчетной области $l = N_x \Delta x = 6.4$ км, где $N_x = NM$ — общее число субъячеек. Расчеты выполнены при разных значениях вероятности облачности p . Реализации облака при $p = 0.4$ и $p = 0.8$ показаны на Рисунке 4.3. Такая модель приводит к экспоненциальному распределению длин хорд, что соответствует экспериментальным исследованиям (см. [43] и [332], а также ссылки в них).

4.3.2 Статистические свойства объема облака

Для определения статистических свойств объема облака необходимо получить большое количество реализаций распределения функции-индикатора f . Для того, чтобы ускорить расчет, вычисления производятся только для слоя облака. Такой подход является точным для определения статистики геометрии облака и приближенным для расчета статистики коэффициента пропускания прямого солнечного излучения. Покажем это. Рассмотрим $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} = e^{-\tau_{\text{ext}}^{0\odot}} \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{1\odot}}}$, где $\tau_{\text{ext}}^{i\odot}$ – оптическая толщина в среде i . Для конкретной реализации функции-индикатора f величина $\tau_{\text{ext}}^{i\odot}$ принимает значения:

$$\tau_{\text{ext}}^{1\odot}(x, z) = \begin{cases} 0, & h_2 < z \leq h \\ \frac{\sigma_c}{\mu_{\odot}} \int_z^{h_2} f[x - (z' - z) \tan \theta_{\odot}] dz', & h_1 \leq z \leq h_2 \\ \frac{\sigma_c}{\mu_{\odot}} \int_0^{h_2 - h_1} f[x - (z' + h_1 - z) \tan \theta_{\odot}] dz', & 0 \leq z < h_1 \end{cases}. \quad (4.55)$$

Так как функция $f(x)$ определена для $x \geq 0$, первый интеграл может быть посчитан для x , при которых $x \geq (h_2 - h_1) \tan \theta_{\odot}$, а второй интеграл определен для всех x , при которых $x \geq h_2 \tan \theta_{\odot}$. Введем функцию $T(z) = \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{1\odot}(x, z)}}$. Тогда $T(z) = 1$ при $z > h_2$, и $T(z) = T(h_1)$ для $z < h_1$. Последнее равенство является следствием из (4.55), допущения однородности и инвариантности свойств f . Поэтому достаточно посчитать $T(z)$ в слое облака, то есть для $h_1 \leq z \leq h_2$. С $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'}$ поступаем аналогично. Рассмотрим $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})' } = e^{-\tau_{\text{ext}}^{0\odot}} \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{1\odot}})'}$ и введем функцию $T'(z) = \overline{f'(x) (e^{-\tau_{\text{ext}}^{1\odot}(x, z)})'}$. Тогда $T'(z) = 0$ для $z > h_2$, но, к сожалению, $T'(z) \neq T'(h_1)$ для $z < h_1$. Тем не менее, как видно на рисунке 4.4, аппроксимация $T'(z) \approx T'(h_1)$ для $z < h_1$ не приводит к значительной ошибке.

Для 2000 реализаций функции-индикатора f рассчитаны усредненные по ансамблю значения $\overline{f}(x)$, $\overline{f'^2}(x)$, $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}(x, z)$ и $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'(x, z)}$, а также длины областей с облаком и без облака λ_1 и λ_0 , соответственно. На рисунке 4.5 показаны усредненные по ансамблю значения доли облачности $\overline{f}(x)$ и коэффициента пропускания $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}(x, h_1)$ на уровне нижней границы облака h_1 . Так как \overline{f} и $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$ не зависят сильно от x , допущение об однородности справедливо. Средние значения \overline{f} , $\overline{f'^2}$, $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}(z)$ и $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'(z)}$ рассчитываются с помощью усреднения по координате x . Для усреднения коэффициента пропускания по координате учтем, что $(h_2 - h_1) \tan \theta_{\odot} < h_2 \tan \theta_{\odot}$ и используем субинтервал $h_2 \tan \theta_{\odot} \leq x \leq l$. Геометрическая статистика для рассмотренной модели приведена в таблице 4.1.

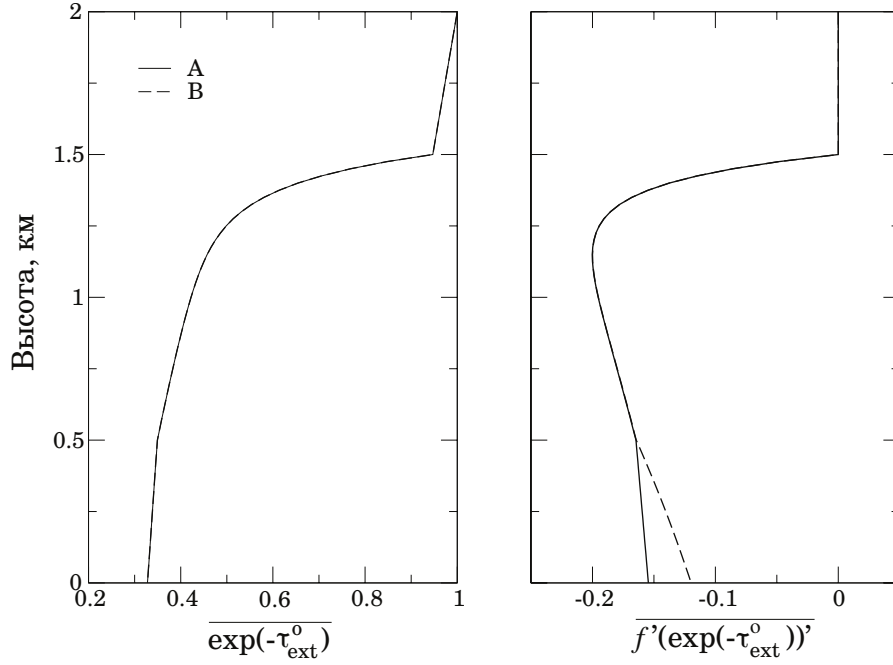


Рисунок 4.4 — Коэффициенты пропускания прямого солнечного излучения $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}(z)}$ и $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'(z)}$, рассчитанные с помощью численного усреднения только по слою облака (A) и с помощью решения уравнения (4.47) (B).

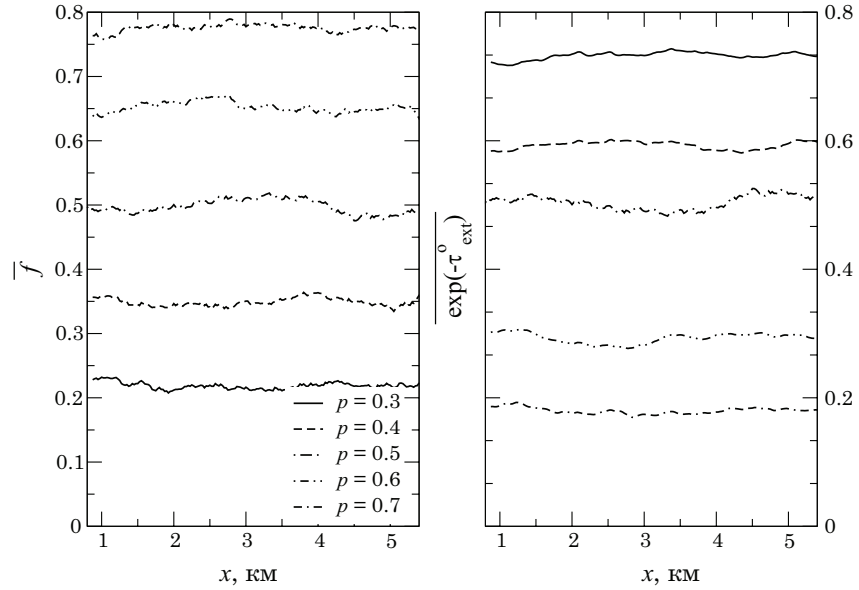


Рисунок 4.5 — Усредненные по ансамблю значения параметра облачности $\overline{f}(x)$ и коэффициента пропускания $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}(x, h_1)}$ для различных значений вероятности облачности p при угле падения 30° .

Таблица 4.1 — Геометрическая статистика при различных значениях вероятности облачности p , а также теоретические значения доли облачности \bar{f}_{th}

p	\bar{f}_{th}	\bar{f}	\bar{f}^2	λ_1 , км	λ_0 , км
0.2	0.122	0.123	0.108	0.771	5.603
0.3	0.228	0.219	0.171	1.384	4.990
0.4	0.358	0.349	0.227	2.210	4.165
0.5	0.500	0.497	0.250	3.134	3.240
0.6	0.642	0.652	0.226	4.107	2.268
0.7	0.771	0.775	0.174	4.908	1.466
0.8	0.878	0.875	0.108	5.560	0.814

Таблица 4.2 — Оптимальные значения поправочного фактора для прямого солнечного излучения q_0 как функция вероятности облачности p

p	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
q_0	0.77	1.08	1.31	1.40	1.29	1.06	0.76

4.3.3 Поправочный коэффициент для прямого солнечного излучения

Оптимальное значение корректирующего фактора для прямого солнечного излучения q_0 получается из решения (4.48). Решение $\mathbf{T}_{\odot q}$ стохастического уравнения переноса (4.47) при $\Sigma_{\odot q} = \Sigma_q$ ($\mu_{\odot} = 0$) рассчитывается с помощью метода дискретных ординат с матричной экспонентой. На рисунке 4.6 показана относительная ошибка первого компонента вектора прямого солнечного излучения, то есть $\varepsilon_{\odot}(q) = ||[\mathbf{I}_{\odot}]_1 - [\mathbf{I}_{\odot q}]_1||_{2z} / ||[\mathbf{I}_{\odot}]_1||_{2z}$ как функция корректирующего фактора q . Зависимость имеет единственный минимум в окрестности $q = 1$. На рисунке 4.7 показаны оптимальные значения корректирующего фактора и соответствующие относительные ошибки как функция угла падения θ_{\odot} . На графиках видно, что q_0 почти не зависит от угла падения, а зависит только от статистики облака. Относительная ошибка при этом меньше 0.2%, однако больше при больших углах падения. Заметим, что значения q_0 почти одинаковы для p и $1 - p$, что видно в Таблице 4.2.

4.3.4 Эталонное решение

Эталонное решение рассчитывается с помощью кода SHDOM [187] в двухмерной геометрии с адаптивной сеткой. Пространственное разрешение базовой сетки $\Delta x = \Delta z = 0.025$ км, число дискретных ординат $(N_{\mu} = 32) \times (N_{\varphi} = 64)$, точность решения 10^{-4} . Расчет выпол-

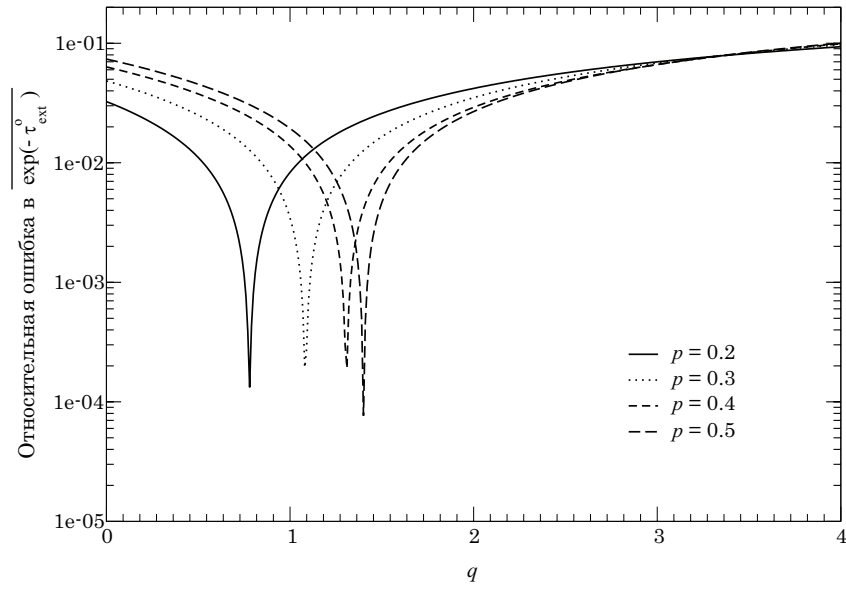


Рисунок 4.6 — Относительная ошибка среднего коэффициента пропускания $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$ как функция поправочного коэффициента q для нескольких значений вероятности облачности p . Угол падения равен 30° .

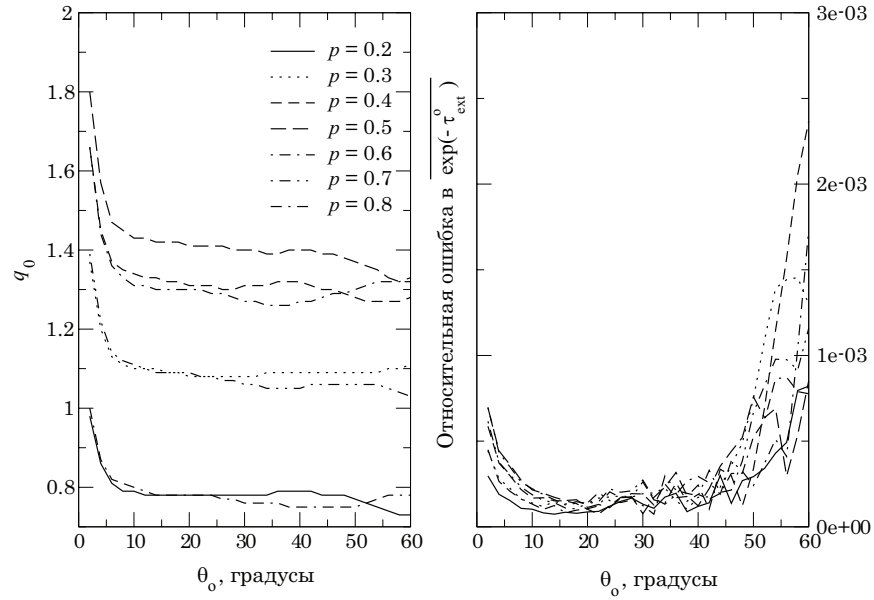


Рисунок 4.7 — Оптимальные значения поправочного фактора для прямого солнечного излучения q_0 и соответствующие им ошибки среднего коэффициента пропускания $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$ как функции угла падения θ_{\odot} для разных значений вероятности облачности p .

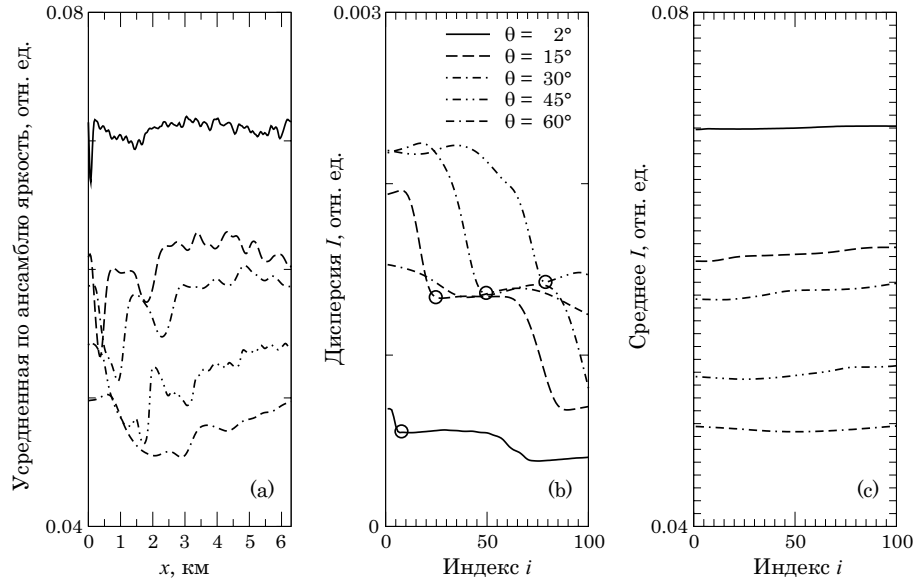


Рисунок 4.8 — (a) Усредненные по ансамблю значения яркости на верхней границе атмосферы $\bar{I}(x, h, \theta)$ при разных значениях угла рассеяния θ . (b) Дисперсия усредненной по ансамблю яркости $\bar{I}(x, h, \theta)$, усредненной на интервале $l_{\min} \leq x \leq l$, где $l_{\min} = i\Delta x$, i – индекс ячейки. Кругами показано начало области, в которой дисперсия \bar{I} меняется слабо (плато). Длина интервала анализа $l = N_x \Delta x$, где $N_x = 256$. (c) Среднее значение усредненной по ансамблю яркости $\bar{I}(x, h, \theta)$, усредненной на интервале $l_{\min} \leq x \leq l$. $\theta_\odot = 0^\circ$, $p = 0.5$.

нен для периодических граничных условий. Средняя яркость на верхней границе атмосферы $\bar{I}(h, \theta)$ рассчитывается путем усреднения по ансамблю 200 реализаций функции f , и далее усреднения по оси x . Зенитные углы рассеяния лежат в диапазоне $-70^\circ < \theta < 70^\circ$, причем положительные значения θ соответствуют азимутальному углу $\varphi = 0^\circ$, а отрицательные значения – углу $\varphi = 180^\circ$. Разрешение по углу вылета равно $\Delta\theta = 1^\circ$.

Модель с одномерной статистикой облака является двумерной моделью переноса излучения. Для сравнения последней с одномерными моделями её необходимо усреднить по горизонтальной координате. Для численного усреднения двухмерного уравнения переноса (4.1) необходимо, чтобы расчетная область была конечного размера. Мы же рассмотрели теоретически модель с облаком бесконечной горизонтальной протяженности, что является принципиально иной краевой задачей: при периодических граничных условиях некоторые характеристики пересекают слой облака дважды, а в модели с облаком бесконечной протяженности – только один раз. Понятно, что численные отличия будут существенны у границ расчетной области по x . На рисунке 4.8а показаны усредненные по ансамблю значения яркости на верхней границе атмосферы $\bar{I}(x, h, \theta)$ для разных значений углов рассеяния у границ расчетной области по x , где $\bar{I}(x, h, \theta)$ сильно зависит от x и не выполняется условие однородности $\bar{I} = \bar{I}(h, \theta)$. Размер этой области увеличивается с ростом угла рассеяния.

Для корректного усреднения по x , при котором две краевые задачи (где характеристика пересекает облачный слой один раз и несколько раз) численно эквивалентны, проведем его на интервале $l_c \leq x \leq l$, где l_c – некоторое критическое значение, такое что средняя яркость $\bar{I}(h, \theta) = \int_{l_0}^l \bar{I}(x, h, \theta) dx / (l - l_0)$ не меняется при $l_0 \geq l_c$. На графиках (b) и (c) рисунка 4.8 показаны дисперсия и среднее по ансамблю значение $\bar{I}(x, h, \theta)$, усредненные по $l_{\min} \leq x \leq l$ для случая $\theta > 0$. Среднее значение $\bar{I}(x, h, \theta)$ меняется больше чем на 2%, если интервал усреднения уменьшается на 40%. Для $\theta \leq 45^\circ$ дисперсия $\bar{I}(x, h, \theta)$ уменьшается и выходит на плато. Поэтому положим $l_{\min} = \min(l_p, l_s)$, где l_p соответствует началу выхода на плато, а l_s – максимальная длина, при которой можно получить достаточно точное усреднение, к примеру, $l_s = 0.5l$.

4.3.5 Точность методов аналитического усреднения

Перед тем как проверять точность методов аналитического усреднения, мы проверим сходимость итерационного метода решения уравнения переноса (4.51). На рисунке 4.9 показана относительная ошибка средней яркости на верхней границе атмосферы, рассчитанной по формуле

$$\varepsilon_n = \|\bar{I}^{(n)}(h, \theta) - \bar{I}^{(n-1)}(h, \theta)\|_{2\theta} / \|\bar{I}^{(n)}(h, \theta)\|_{2\theta},$$

где n – номер итерации, и $\|\cdot\|_{2\theta}$ – L_2 -норма на интервале изменения зенитного угла рассеяния. На рисунке видно, что скорость сходимости очень быстрая и что относительная ошибка на второй итерации меньше 1%. Так как вектор яркости на первой итерации является решением уравнения переноса (4.46) для двухмерного облака с одинаковыми характеристическими размерами (λ_0 и λ_1) по осям x и y , то из малости относительной ошибки на второй итерации можно сделать вывод, что свойства одномерного и двухмерного облаков с точки зрения переноса излучения практически одинаковые.

Далее мы проанализируем следующие методы аналитического усреднения:

1. стохастическая модель, использующая решение в первой итерации (STM1), то есть стохастическая модель, включающая уравнение переноса (4.46), в котором $\mathbf{I}' = 0$;
2. стохастическая модель, в которой пренебрегается вектором \mathbf{I}_∇ , содержащим зависимость от $\nabla f'$ (STM2), т.е. стохастическая модель, основанная на уравнении переноса (4.46), в котором $\mathbf{I}' = 0$ и $\Sigma_q = \Sigma_q(\mu = 1, z)$;

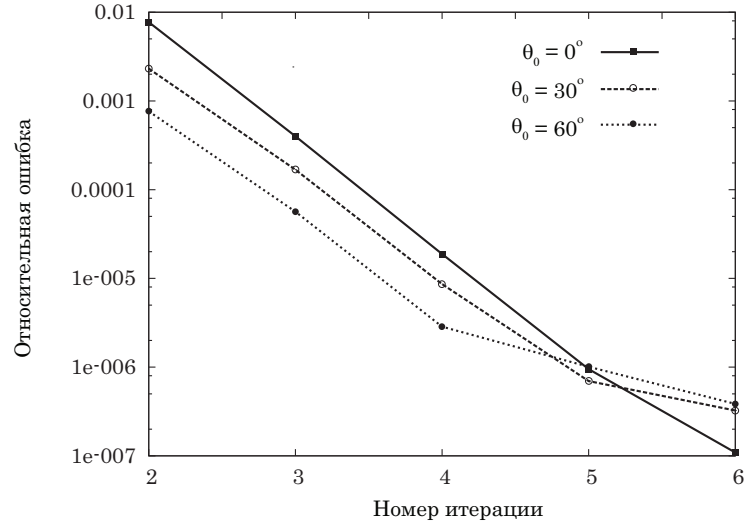


Рисунок 4.9 — Относительная ошибка средней яркости на верхней границе атмосферы $\bar{I}(h, \theta)$ для разных значений угла падения θ_\odot при вероятности облачности $p = 0.5$.

3. модель внешнего смешивания (*external mixing model* – EMM), в которой среднее значение яркости на верхней границе атмосферы рассчитывается как $\bar{I}(h, \theta) = \bar{f}I_1(h, \theta) + (1 - \bar{f})I_0(h, \theta)$, где I_1 – яркость при однородном облаке, а I_0 – яркость при чистом небе.

Модели STM1 и STM2 учитывают горизонтальную неоднородность оптических свойств облака и функции яркости, в то время как модель EMM не учитывает. Но STM1 учитывает неоднородность и для прямого солнечного излучения, и для диффузионной части явно, а STM2 учитывает неоднородность для прямого солнечного излучения явно и для диффузионной части неявно через функцию источников. STM2 интересна своей простотой – если нет \mathbf{I}_∇ , то все построения для расчета (4.25) становятся не нужными.

Для использования модели STM1 необходимо знать корректирующий фактор q для диффузионной части яркости. На рисунке 4.10 показаны относительные ошибки средних значений яркости на верхней границе атмосферы

$$\varepsilon_{\text{STM1}} = \|\bar{I}_{\text{STM1}}(h, \theta) - \bar{I}_{\text{SHDOM}}(h, \theta)\|_{2\theta} / \|\bar{I}_{\text{SHDOM}}(h, \theta)\|_{2\theta},$$

как функции корректирующего фактора q . Результаты вычислены для трех значений угла падения θ_\odot и нескольких значений вероятности облачности p . Отметим, что корректирующий фактор q определяет не только точность предположения (4.31), но и эквивалентность двух граничных задач, соответствующих STM1 и SHDOM. При $\theta_\odot = 0^\circ$ зависимость относительной ошибки от q имеет четкий минимум, при $\theta_\odot = 30^\circ$ минимум не столь явный, при $\theta_\odot = 60^\circ$ графики не имеют минимума вовсе. Минимальное значение относительной ошибки меньше

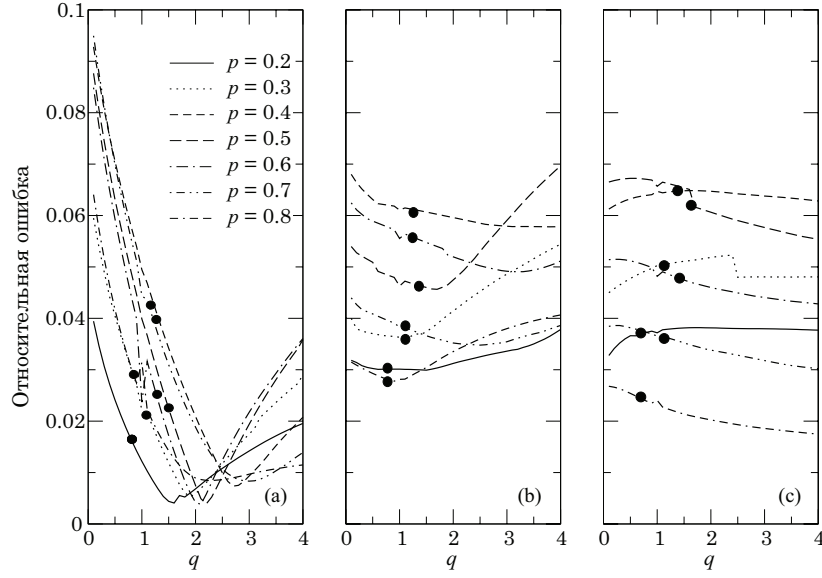


Рисунок 4.10 — Относительные ошибки средней яркости на верхней границе атмосферы как функция корректирующего фактора q при нескольких значений вероятности облачности p для модели STM1 относительно SHDOM при углах падения: (a) $\theta_{\odot} = 0^{\circ}$, (b) $\theta_{\odot} = 30^{\circ}$, и (c) $\theta_{\odot} = 60^{\circ}$. Точками отмечены оптимальные значения корректирующего фактора q_0 .

1% при $\theta_{\odot} = 0^{\circ}$ и увеличивается с ростом угла падения. Оптимальные значения корректирующего фактора для прямого солнечного излучения q_0 сильно отличаются от оптимальных значений q при $\theta_{\odot} = 0^{\circ}$, однако близки к ним при $\theta_{\odot} = 30^{\circ}$. В виду отсутствия критерия выбора q и наличия метода для расчета q_0 , положим $q = q_0$. При этом ошибки модели STM1 не будут минимальны.

Зависимости средних значений яркости на верхней границе атмосферы от угла рассеяния приведены на рисунке 4.11: показаны решения, полученные методами аналитического усреднения, а также эталонное решение. Можно увидеть общую закономерность: модель ЕММ завышает значения средней яркости, а модели STM1 и STM2 иногда завышают, иногда преуменьшают $\bar{I}(h, \theta)$. Для всех значений угла падения у модели STM1 достаточно хорошая точность, особенно при положительных углах падения.

Относительные ошибки средней яркости на верхней границе атмосферы, усредненные по углу рассеяния, показаны на рисунке 4.12. Можно сделать следующие выводы:

1. Модель STM1 является наиболее точной из рассмотренных; модель ЕММ является наименее точной. Относительные ошибки STM1 меньше 6.5%, в то время как относительные ошибки ЕММ могут достигать 15%.
2. Для больших углов падения точность модели STM2 сопоставима с точностью модели STM1. Этот факт можно объяснить для $\mathbf{T}_{\odot q}$ с помощью уравнения (4.47). Уравнение

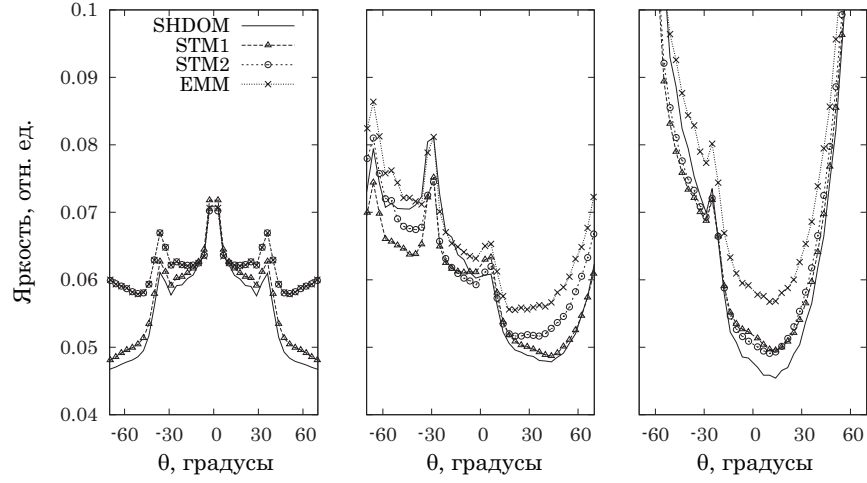


Рисунок 4.11 — Средние значения яркости на верхней границе атмосферы $\bar{I}(h, \theta)$ при трех значениях угла падения: (а) $\theta_{\odot} = 0^\circ$, (б) $\theta_{\odot} = 30^\circ$ и (с) $\theta_{\odot} = 60^\circ$. Вероятность облачности $p = 0.5$.

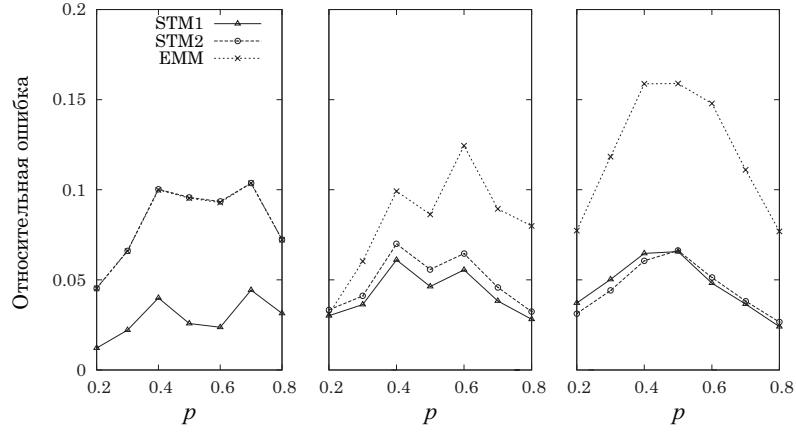


Рисунок 4.12 — Относительные ошибки средней яркости на верхней границе атмосферы, усредненные по углу рассеяния θ для трех значений угла падения: (а) $\theta_{\odot} = 0^\circ$, (б) $\theta_{\odot} = 30^\circ$ и (с) $\theta_{\odot} = 60^\circ$.

(4.47) с матрицей экстинкции $\Sigma_q(\mu_{\odot}, z)$ соответствует модели SMT1, а с матрицей экстинкции $\Sigma_q(\mu_{\odot} = 1, z)$ — модели STM2. Если значение μ_{\odot} велико, то вклад слагаемого $\sqrt{1 - \mu_{\odot}^2}$ в выражении для $\Sigma_q(\mu_{\odot}, z)$ невелик, и поэтому вектор $\mathbf{I}_{\odot q}$ может быть рассчитан достаточно точно при $\mu_{\odot} = 1$.

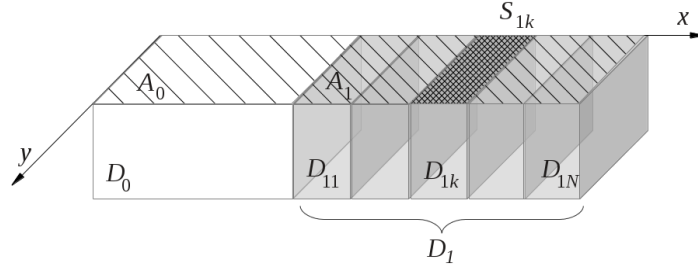


Рисунок 4.13 — Область D , состоящая из области с чистым небом D_0 и области с облаком D_1 .

4.4 Приближенные модели переноса при наличии разорванной облачности

4.4.1 Математическая постановка задачи

Полученная в предыдущей части стохастическая модель обладает низкой скоростью счета по сравнению с решением одномерного уравнения переноса. Поэтому мы рассмотрим квазиодномерные алгоритмы, основанные на алгоритмах смешивания.

Большинство алгоритмов восстановления состава атмосферы построено на приближении независимых столбцов: для каждого пикселя решается одномерная задача в модели плоско-параллельных (псевдосферических) слоев. Дадим этому утверждению математическую формулировку. Для этого рассмотрим некую область в атмосфере D , которая состоит из области с «чистым небом» D_0 и области с облаком D_1 (см. рисунок 4.13). Для упрощения рассуждений предположим, что D , D_0 и D_1 имеют одинаковую вертикальную протяженность. Предположим, что нам известно решение трехмерного уравнения переноса на верхней границе атмосферы $I_{3D}(x, y, z_{\text{ТДА}}) \equiv I_{3D}(x, y)$. Тогда усредненное по области D значение яркости на верхней границе атмосферы $\langle I_{3D} \rangle$ можно представить в виде

$$\langle I_{3D} \rangle = \frac{1}{A} \int_S I_{3D}(x, y) dS, \quad (4.56)$$

где A — площадь поверхности S , которая ограничивает область D на верхнем уровне атмосферы. Проще всего учесть неоднородность среды через соотношение

$$\langle I_{3D} \rangle \approx A_c \langle I_{3D}^1 \rangle + (1 - A_c) \langle I_{3D}^0 \rangle, \quad (4.57)$$

где $A_c = A_1/A$ — геометрический параметр облачности (*geometrical cloud fraction*), A_i с $i = 0, 1$ — площадь поверхности S_i , которая ограничивает D_i на верхнем уровне атмосферы, $\langle I_{3D}^i \rangle = (1/A_i) \int_{S_i} I_{3D}(x, y) dS$ — усредненная по области D_i яркость. Разобьем область с облаком D на

N столбцов, таких что $D = \cup_{k=1}^N D_k$, где D_k – область k -того столбца в области D . Тогда

$$\langle I_{3D} \rangle = (1/A) \sum_{k=1}^N \int_{S_k} I_{3D}(x, y) dS = \sum_{k=1}^N \nu_k \langle I_{3D}^k \rangle,$$

где $\nu_k = A_k/A$ и $\langle I_{3D}^k \rangle = (1/A_k) \int_{S_k} I_{3D}(x, y) dS$. Исключив из рассмотрения многомерные алгоритмы, имеем следующие варианты:

1. В приближении независимых столбцов, описанном в [333, 334], пренебрегается горизонтальным взаимодействием между областями D_k , $k = 1, \dots, N$. Значения $\langle I_{3D}^k \rangle$ рассчитываются в одномерной плоскопараллельной геометрии, т.е. $\langle I_{3D}^k \rangle \approx I_{1D}^k \equiv \mathcal{I}_k$ и $\langle I_{3D} \rangle \approx (1/N) \sum_{k=1}^N \mathcal{I}_k$ при делении D на одинаковые столбы ($\nu_k = 1/N$ для $k = 1, \dots, N$). У этого приближения нет строгого математического обоснования. Несмотря на это, оно широко используется из-за своей концептуальной простоты.
2. В приближении независимых столбцов с модифицированной функцией источников, развитой в [329], прямое солнечное излучение рассчитывается в трехмерной модели, а диффузионная часть решения определяется в приближении независимых столбцов.
3. Развитием приближения независимых столбцов является следующее представление яркости для D :

$$\langle I_{3D}^1 \rangle \approx (1/N) \sum_{k=1}^N \mathcal{I}(\tau_k), \quad (4.58)$$

где τ_k – оптическая толщина столба облака D_{1k} . Если τ_k является частной реализацией случайной переменной τ , то выражение для средней яркости для D приобретает интегральный вид:

$$\langle I_{3D} \rangle \approx \int_0^\infty \mathcal{I}(\tau) p(\tau) d\tau, \quad (4.59)$$

где $p(\tau)$ – плотность вероятности для оптической толщины в области D . Функция $p(\tau)$ может быть аппроксимирована гамма-распределением⁴, как в [335–337], бета-распределением⁵ или логнормальным распределением,⁶ как в [338].

⁴ $p(\tau) = \tau^{\alpha-1} \frac{\exp(-\tau/\beta)}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)}$, где $\Gamma(\alpha) = \int_0^{+\infty} t^{\alpha-1} \exp(-t) dt$ – гамма-функция Эйлера.

⁵ $p(\tau) = \frac{1}{B(\alpha, \beta)} \tau^{\alpha-1} (1-\tau)^{\beta-1}$, где $B(\alpha, \beta) = \int_0^1 t^{\alpha-1} (1-t)^{\beta-1} dt$ – бета-функция.

⁶ $p(\tau) = \frac{1}{\tau \alpha \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln \tau - \beta)^2}{2\alpha^2}\right)$, где α и β – параметры распределений.

4. Если $p(\tau) = \delta(\tau - \bar{\tau})$, где $\bar{\tau}$ – средняя оптическая толщина в области D , то

$$\langle I_{3D} \rangle \approx \mathcal{I}(\bar{\tau}) \quad (4.60)$$

, что характеризует модель внутреннего смешивания. К настоящему времени развито несколько моделей, основанных на масштабировании средней оптической толщины $\bar{\tau}$ для повышения точности аппроксимации (4.60). Так, в [339, 340] предложено приближение $\langle I_{3D} \rangle \approx \mathcal{I}(\bar{\tau}^\alpha)$ (*co-packing exponential model*). В [333] описано приближение эффективной оптической толщины, в которой $\langle I_{3D} \rangle \approx \mathcal{I}(\eta\bar{\tau})$. В приближении эквивалентного однородного облака [341, 342] приближение эффективной толщины дополнено учетом зависимости оптимальной оптической толщины облака от угла падения излучения.

5. Модель линейного смешивания (4.57) можно получить, если записать (4.56) в виде $\langle I_{3D} \rangle \approx \int_0^\infty p(\tau) \mathcal{I}(\tau) d\tau$ и положить $p(\tau) = A_c \delta(\tau - \bar{\tau}_1) + (1 - A_c) \delta(\tau - \tau_0)$, где τ_0 – оптическая толщина в области D_0 , $\bar{\tau}_1$ – средняя оптическая толщина в области D_1 .

Целью дальнейшего рассмотрения будет получение моделей внутреннего и внешнего смешивания из стохастической модели. За основу возьмем уравнение (4.6) стохастической модели нулевого порядка с условиями на верхней ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_t$) и нижней ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_s$) границах:

$$\begin{aligned} \bar{I}_- &= 0, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_t, \\ \bar{I}_+ &= \frac{A}{\pi} F_\odot |\mu_\odot| e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot} + \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| \bar{I}_- d\Omega, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_s, \end{aligned} \quad (4.61)$$

где $\bar{I}_+ = \bar{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_+)$ и $\bar{I}_- = \bar{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_-)$. По аналогии получим уравнение для полного излучения, т.е. для I_t , где $I_t = I + I_\odot$, $I_\odot = F_\odot \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_\odot) e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}$:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \bar{I}_t &= -(\sigma_{\text{ext}}^0 + \bar{f} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) \bar{I}_t - \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f}' \bar{I}'_t \\ &+ \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [(\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \bar{f} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) \bar{I}_t + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \bar{f}' \bar{I}'_t] d\Omega' \\ \bar{I}_{t-} &= F_0 \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_\odot), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_t \\ \bar{I}_{t+} &= \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| \bar{I}_{t-} d\Omega, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_s. \end{aligned} \quad (4.62)$$

Выражение для нерассеянной компоненты I_\odot является решением следующего уравнения:

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I_\odot = -(\sigma_{\text{ext}}^0 + f \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) I_\odot, \quad (4.63)$$

при этом

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \bar{I}_{\odot} = -(\sigma_{\text{ext}}^0 + \bar{f}\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) \bar{I}_{\odot} - \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f}' \bar{I}'_{\odot}, \quad (4.64)$$

и среднее значение коэффициента пропускания нерасеянной компоненты $T = e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}$ рассчитывается как

$$\bar{T}_{\odot} = e^{-\frac{1}{\mu_{\odot}} \int_z^{z_t} (\sigma_{\text{ext}}^0 + \bar{f}\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) dz'} - \frac{1}{\mu_{\odot}} \int_z^{z_t} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \bar{f}' \bar{T}'_{\odot} e^{-\frac{1}{\mu_{\odot}} \int_z^{z'} (\sigma_{\text{ext}}^0 + \bar{f}\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) dz'} dz'. \quad (4.65)$$

Примем те же допущения, что и в параграфе 4.2.4. Из них следует, что среднее значение яркости не зависит от x и y , то есть $\bar{I} = \bar{I}(z, \mathbf{\Omega})$. Это следствие является необходимым условием эргодичности. Покажем это. Обозначим за $I(f_0, x, y)$ яркость на верхней границе атмосферы при реализации f_0 случайной функции f . Тогда сигнал, приходящий на детектор, равен средней по пространству яркости $\langle I(f_0) \rangle = (1/A) \int_S I(f_0, x, y) dS$. Очевидно при этом, что $\langle I(f) \rangle$ является случайной величиной. Предположим, что $\overline{I(f, x, y)} = \bar{I} = \text{const}$. Тогда среднее значение $\langle I(f) \rangle$ по ансамблю равно $\overline{\langle I(f) \rangle} = (1/A) \int_S \bar{I}(f, x, y) dS = \bar{I}$. Согласно закону больших чисел, дисперсия $\langle I(f) \rangle$ уменьшается с ростом A как $1/A$. Если выполняется условие эргодичности, то $\langle I(f_0) \rangle \approx \bar{I}$ и измеряемый детектором сигнал приближенно равен усредненной по ансамблю яркости.

4.4.2 Модели внутреннего смешивания как стохастические модели нулевого порядка

В модели внутреннего смешивания для расчета яркости при неоднородном облаке сначала определяются эффективные оптические параметры среды согласно некоторым правилам. Затем расчет производится для одномерной системы с эффективными параметрами. С математической точки зрения для решения (4.6) и (4.62) необходимо сформулировать условия замыкания для $\bar{f}' \bar{I}'$ и $\bar{f}' \bar{I}'_t$, соответственно. Модель внутреннего смешивания для диффузной части яркости («ID» от «internal diffuse») получается, если положить в (4.6):

$$\bar{f}' \bar{I}' = -(1 - \eta) \bar{f} \bar{I}. \quad (4.66)$$

Коэффициент $-(1 - \eta)$, где $0 \leq \eta \leq 1$ является мерой корреляции между f и I . Причем из (4.66) следует, что эта корреляция отрицательная и постоянная. Функция \bar{I} является решением уравнения переноса излучения с постоянным коэффициентом экстинкции $\sigma_{\text{ext}}^0 + \eta \bar{f} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}$, произведением коэффициента рассеяния и индикатрисы рассеяния $\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \eta \bar{f} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1$ и функ-

цией источников

$$J_{\odot}^{\text{ID}} = \frac{F_{\odot}}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \bar{f} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} + \frac{F_{\odot}}{4\pi} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})}. \quad (4.67)$$

Модель внутреннего смешивания для полной яркости («IT» от «internal total») получается при следующем допущении в (4.62):

$$\overline{f'I_t} = -(1 - \eta) \bar{f} \overline{I_t}. \quad (4.68)$$

Тогда диффузная часть яркости является решением уравнения переноса с коэффициентом экстинкции $\sigma_{\text{ext}}^0 + \eta \bar{f} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}$, произведением коэффициента рассеяния и индикатрисы рассеяния $\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \eta \bar{f} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1$ и функцией источников

$$J_{\odot}^{\text{IT}} = \frac{F_{\odot}}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \eta \bar{f} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) e^{-\overline{\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}, \quad \overline{\tau_{\text{ext}}^{\odot}} = \frac{1}{\mu_{\odot}} \int_z^{z_t} (\sigma_{\text{ext}}^0 + \eta \bar{f} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) dz'. \quad (4.69)$$

В обоих случаях мы приходим к одномерному уравнению переноса с коэффициентом экстинкции, представленным как линейная комбинация коэффициентов экстинкции чистого неба и облака:

$$\overline{\sigma_{\text{ext}}} = (1 - \bar{f}) \sigma_{\text{ext}}^0 + \bar{f} (\sigma_{\text{ext}}^0 + \eta \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) = \sigma_{\text{ext}}^0 + \eta \bar{f} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}. \quad (4.70)$$

Эти модели отличаются функциями источников. Если корреляции между f и I нет, т.е. $\eta = 1$, из неравенства Йенсена⁷ следует, что $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} \geq e^{-\overline{\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$. Из (4.65) получаем:

$$\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} = e^{-\overline{\tau_{\text{ext}}^{\odot}}} - \frac{1}{\mu_{\odot}} \int_z^{z_t} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})}' e^{-\frac{1}{\mu_{\odot}} \int_z^{z'} (\sigma_{\text{ext}}^0 + \bar{f} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) dz''} dz' \quad (4.71)$$

и

$$\begin{aligned} J_{\odot}^{\text{ID}} - J_{\odot}^{\text{IT}} &= -\frac{F_{\odot}}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \bar{f} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) \frac{1}{\mu_{\odot}} \int_z^{z_t} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})}' e^{-\frac{1}{\mu_{\odot}} \int_z^{z'} (\sigma_{\text{ext}}^0 + \bar{f} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) dz''} dz' \\ &+ \frac{F_{\odot}}{4\pi} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Так как $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})}' < 0$, первое слагаемое в правой части (4.72) положительное, а второе отрицательное. Поэтому нельзя сказать, что больше $-J_{\odot}^{\text{ID}}$ или J_{\odot}^{IT} . Например, если можно пренебречь $\sigma_{\text{sct}}^0 P_0$ (влиянием рассеяния на молекулах воздуха) и $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})}'$ и $\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}$ практически не

⁷ $\overline{\varphi(\mathbf{x})} \geq \varphi(\overline{\mathbf{x}})$, где φ – выпуклая скалярная функция, \mathbf{x} – действительная переменная.

зависят от z , то

$$J_{\odot}^{\text{ID}} - J_{\odot}^{\text{IT}} \approx \frac{F_{\odot}}{4\pi} \sigma_{\text{sct}}^{\text{1d}} P_1 \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})} e^{-\frac{1}{\mu_{\odot}} \bar{f} \sigma_{\text{ext}}^{\text{1d}} (z_{\text{t}} - z)} < 0, \quad (4.73)$$

но если величиной $\sigma_{\text{sct}}^0 P_0$ пренебречь нельзя, то возможна ситуация, когда $J_{\odot}^{\text{ID}} > J_{\odot}^{\text{IT}}$.

В [330] в рамках двухпотоковой модели предположено, что корреляция зависит от угла рассеяния:

$$\overline{f'I_{\text{t}}} = (1 - \eta) \mu \bar{f} \overline{I_{\text{t}}}. \quad (4.74)$$

Тогда для восходящего потока корреляция положительна, а для нисходящего потока корреляция отрицательна. В мультипотоковой модели такое допущение приводит к росту времени счета, так как матрица слоя теряет симметрию и размерность задачи на собственные значения нельзя уменьшить процедурой Stamnes-Swanson [58]. Однако симметрия матрицы сохранится при следующем допущении:

$$\overline{f'I_{\text{t}}} = -(1 - \eta) |\mu| \bar{f} \overline{I_{\text{t}}}. \quad (4.75)$$

В этом контексте основной задачей является нахождение коэффициента корреляции η . В принципе, для вектора \mathbf{b} , содержащего детерминистические параметры уравнения переноса, оптимальное значение η может быть вычислено как

$$\eta_{\text{opt}}(\bar{f}, \mathbf{b}) = \arg \min_{\eta} \left\| \bar{\mathcal{I}}(\eta \bar{f}, z_{\text{t}}, \theta, \mathbf{b}) - \bar{I}_{\text{ref}}(\bar{f}, z_{\text{t}}, \theta, \mathbf{b}) \right\|_{2\theta}, \quad (4.76)$$

где \bar{I}_{ref} – среднее значение яркости на верхней границе атмосферы, рассчитанное в рамках трехмерной модели, $\bar{\mathcal{I}}$ – значение яркости на верхней границе атмосферы, рассчитанное в модели внутреннего смешивания, $\|\cdot\|_{2\theta}$ – норма по L_2 на интервале углов рассеяния θ . Та же идеология используется в приближении эквивалентного однородного облака [341, 342]. Вектор \mathbf{b} может включать в себя также угол падения, параметры облака, оптическую толщину атмосферы, альбедо поверхности и т.д. Для сокращения времени счета можно посчитать $\eta_{\text{opt}}(\bar{f}, \mathbf{b}_0)$ для некоего усредненного вектора \mathbf{b}_0 , а затем использовать модель внутреннего смешивания, положив $\eta(\bar{f}, \mathbf{b}) = \eta_{\text{opt}}(\bar{f}, \mathbf{b}_0)$ при $\mathbf{b} \neq \mathbf{b}_0$. В свете (4.76) модель внутреннего смешивания можно рассматривать как параметризацию многомерной модели. Отметим также, что *co-packing exponent* модель [339, 340] получается, если η ищется в виде

$$\eta(\alpha) = \frac{1}{\bar{f}\tau_1} \left[(\tau_0 + \bar{f}\tau_1)^{\alpha} - \tau_0 \right], \quad (4.77)$$

где $\tau_0 = \int_0^{z_t} \sigma_{\text{ext}}^0 dz$ и $\tau_1 = \int_0^{z_t} \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}} dz$ – оптические толщины чистого неба и облака, соответственно, а параметр $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ минимизирует расхождение между $\bar{\mathcal{I}}(\eta(\alpha)\bar{f}, \cdot)$ и \bar{I}_{ref} . Тогда функция $\bar{\mathcal{I}}$ является решением уравнения переноса при

$$\bar{\tau} = \tau_0 + \eta\bar{f}\tau_1 = (\tau_0 + \bar{f}\tau_1)^\alpha. \quad (4.78)$$

4.4.3 Приближенные модели на основе модели независимых столбцов

Рассмотрим двухмерное облако, которое задается случайной функцией $f(x, y)$, и введем случайную функцию \mathcal{I} , такую, что она является решением одномерной краевой задачи

$$\begin{aligned} \mu \frac{d\mathcal{I}}{dz} &= -(\sigma_{\text{ext}}^0 + f\sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}})\mathcal{I} + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + f\sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) \mathcal{I} d\Omega' + \mathcal{J}_\odot(f), \\ \mathcal{I}_- &= 0, \quad z = z_t, \\ \mathcal{I}_+ &= \frac{A}{\pi} F_\odot |\mu_\odot| \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} + \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| \mathcal{I}_- d\Omega, \quad z = z_s, \end{aligned} \quad (4.79)$$

предполагая, что параметры однородного слоя такие, как в точке с координатой (x, y) исходной задачи. В этом смысле \mathcal{I} является функцией f .

Для функции $\mathcal{J}_\odot(f)$ справедливо, что $\overline{\mathcal{J}_\odot} = J_\odot^{\text{ID}}$, где выражение для J_\odot^{ID} дается формулой (4.67). \mathcal{J}_\odot может быть как случайной функцией:

$$\mathcal{J}_\odot(f) = \frac{F_\odot}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + f\sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} + \frac{F_\odot}{4\pi} \frac{f}{\bar{f}} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'}, \quad (4.80)$$

так и детерминистической:

$$\mathcal{J}_\odot = \frac{F_\odot}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \bar{f}\sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} + \frac{F_\odot}{4\pi} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'}. \quad (4.81)$$

Усредняя по ансамблю уравнение (4.79), можно показать, что $\bar{\mathcal{I}}$ и \bar{I} являются решениями одной и той же краевой задачи (4.6). Иными словами, стохастические модели нулевого порядка для \mathcal{I} и I совпадают. Поэтому предположим, что

$$\bar{I} \approx \bar{\mathcal{I}}. \quad (4.82)$$

Решение уравнения (4.79) можно получить с помощью процедуры статистического усреднения, описанной в части 4.2.2, которая использовалась для решения уравнения (4.1). Бесконечная система уравнений для $\bar{\mathcal{I}}$ и $\overline{f^n \mathcal{I}'}$, $n \geq 1$, не совпадает с бесконечной системой уравнений для \bar{I} и $\overline{f^n I'}$, $n \geq 1$, так как функции источников различны, однако стохастические модели нулевого порядка совпадают. Далее возможны два варианта.

(а) Плотность вероятности $p_{\mathcal{I}}$ функции \mathcal{I} не задана:

Тогда $\bar{\mathcal{I}}$ можно рассчитать следующим образом. Введем случайную функцию $g = G(f)$, такую, что G имеет обратную функцию и положим $\mathcal{I}(f) = \mathcal{I}(G^{-1}(g)) = \mathcal{I}_g(g)$. Далее рассмотрим разложение функции \mathcal{I}_g в ряд Тейлора в окрестности \bar{g} ,

$$\mathcal{I}_g(g) = \mathcal{I}_g(\bar{g}) + \mathcal{I}'_g(\bar{g})(g - \bar{g}) + \frac{1}{2}\mathcal{I}''_g(\bar{g})(g - \bar{g})^2 + \dots \quad (4.83)$$

отбросим слагаемые, начиная с квадратичного, и усредним по ансамблю. В результате получим

$$\overline{\mathcal{I}_g(g)} \approx \mathcal{I}_g(\bar{g}). \quad (4.84)$$

Далее, определим η как решение уравнения

$$G(\eta f) = \bar{g}. \quad (4.85)$$

Тогда

$$\bar{\mathcal{I}} = \overline{\mathcal{I}_g(g)} \approx \mathcal{I}_g(\bar{g}) = \mathcal{I}(G^{-1}(G(\eta f))) = \mathcal{I}(\eta f). \quad (4.86)$$

Для \mathcal{J}_{\odot} , как и в (4.81), мы получаем модель внутреннего смешивания для диффузной компоненты решения. В частности для $G(f) = \tau_0 + f\tau_1$ мы получаем модель внутреннего смешивания с $\eta = 1$. Тем не менее существуют некоторые условия на функцию G : она должна быть такой, чтобы можно было пренебречь слагаемыми в (4.83), начиная со второго порядка. В приближении эффективной толщины функция $G(f) = \log(\tau_0 + f\tau_1)$ удовлетворяет этому условию для модели ограниченного каскада [333]. Решение $\eta_{\text{ЕТА}}$ уравнения (4.85) имеет вид

$$\eta_{\text{ЕТА}}(\bar{f}, \tau_1) = \frac{1}{\bar{f}\tau_1} \left[10^{\overline{\log(\tau_0 + f\tau_1)}} - \tau_0 \right]. \quad (4.87)$$

С математической точки зрения приближение эффективной толщины является очень строгой моделью, так как функция G должна удовлетворять сильному условию и $\eta_{\text{ЕТА}}$ определяется из (4.85) единственным образом. Для облаков, у которых оптическая толщина сильно зависит от горизонтальных координат, приведенная выше функция G может привести к большим

ошибкам. Поэтому введем коэффициенты $\eta_{\text{ЕТА}}^\alpha$, которые являются решением уравнения (4.85), и вычислим α . При этом $\eta_{\text{ЕТА}}^\alpha$ является параметризацией коэффициента корреляции η_{opt} , введенного в (4.76). Положим $G(f) = \log(\tau_0 + \alpha f \tau_1)$. Тогда

$$\eta_{\text{ЕТА}}^\alpha(\bar{f}, \tau_1) = \frac{1}{\alpha \bar{f} \tau_1} \left[10^{\overline{\log(\tau_0 + \alpha f \tau_1)}} - \tau_0 \right], \quad (4.88)$$

где $\alpha = \alpha_{\text{opt}}$ – решение следующей задачи оптимизации

$$\alpha_{\text{opt}}(\tau_1) = \arg \min_{\alpha} \int_0^1 \left[\eta_{\text{ЕТА}}^\alpha(\bar{f}, \tau_1) - \eta_{\text{opt}}(\bar{f}, \mathbf{b}_0) \right]^2 d\bar{f}. \quad (4.89)$$

В (4.89) α_{opt} рассчитывается для вектора \mathbf{b}_0 , а $\eta_{\text{ЕТА}}^\alpha$ и $\eta_{\text{ЕТА}}$ зависят только от оптической толщины облака τ_1 ⁸. Другая параметризация, аналогичная (4.77), соответствует функции $G(f) = (\tau_0 + f \tau_1)^\alpha$ и имеет вид:

$$\eta_{\text{ЕТА}}^\alpha(\bar{f}, \tau_1) = \frac{1}{\bar{f} \tau_1} \left[\left((\tau_0 + f \tau_1)^\alpha \right)^{1/\alpha} - \tau_0 \right]. \quad (4.90)$$

(б) Плотность вероятности $p_{\mathcal{I}}$ для \mathcal{I} известна, или, что тоже самое, p_f для f известна.

Тогда среднее значение для \mathcal{I} может быть рассчитано следующим образом:

$$\bar{\mathcal{I}}(x, y) = \int \mathcal{I} p_{\mathcal{I}}(\mathcal{I}, x, y) d\mathcal{I} = \int \mathcal{I}(f) p_f(f, x, y) df. \quad (4.91)$$

Эта модель эквивалента приближению независимых столбцов (4.59) в стохастической теории переноса. В этом контексте становится понятным, что допущение об эргодичности и допущение (4.82) составляют математическую основу приближения независимых столбцов. В случае однородной статистики имеем $p_f = p_f(f)$ и

$$\bar{\mathcal{I}} = \int \mathcal{I}(f) p_f(f) df. \quad (4.92)$$

Более того, если облако не полностью покрывает небо и известна плотность вероятности для f в облаке $p_{1f}(f)$ ($\int p_{1f}(f) df = 1$), то в качестве $p_f(f)$ можно взять

$$p_f(f) = (1 - p_0) \delta(f) + p_0 p_{1f}(f),$$

⁸Фактически $\eta_{\text{ЕТА}}^\alpha$ является параметризацией приближения эффективной толщины, если $\eta_{\text{ЕТА}}^\alpha$ слабо зависит от \mathbf{b} (но не от τ_1).

где $p_0 = \bar{f}/\bar{f}_1$, $\bar{f} = \int f p_f(f) df$ – среднее значение f в атмосфере, и $\bar{f}_1 = \int f p_{1f}(f) df$ – среднее значение f в облаке. В этом случае

$$\bar{\mathcal{I}} = (1 - p_0) \mathcal{I}(0) + p_0 \int \mathcal{I}(f) p_{1f}(f) df.$$

Так как в модели разорванной облачности f может иметь одно из двух значений ($f = 0$ в чистом небе и $f = 1$ в облаке), то $p_{1f}(f) = \delta(1 - f)$, $\bar{f}_1 = 1$, и $p_0 = \bar{f}$. Отсюда $p_f(f) = (1 - \bar{f})\delta(f) + \bar{f}\delta(1 - f)$, и

$$\bar{\mathcal{I}} = (1 - \bar{f}) \mathcal{I}(0) + \bar{f} \mathcal{I}(1). \quad (4.93)$$

Модель (4.93) с функцией-источником \mathcal{J}_\odot из (4.80) является моделью внешнего смешивания для диффузной компоненты (ED от англ. «*external diffuse*»). Диффузионная часть яркости $\mathcal{I}(0)$ является решением уравнения переноса излучения для чистой атмосферы с коэффициентом экстинкции σ_{ext}^0 , произведением коэффициента рассеяния на индикатрису $\sigma_{\text{sct}}^0 P_0$ и функцией источников

$$J_{0\odot}^{\text{ED}} = \frac{F_\odot}{4\pi} \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}}. \quad (4.94)$$

Диффузионная часть яркости $\mathcal{I}(1)$ является решением уравнения переноса излучения для атмосферы со сплошным облаком в горизонтальных направлениях с коэффициентом экстинкции $\sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}$, произведением коэффициента рассеяния на индикатрису $\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1$ и функцией источников

$$J_{1\odot}^{\text{ED}} = \frac{F_\odot}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} + \frac{F_\odot}{4\pi} \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1 \frac{1}{\bar{f}} \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})'}. \quad (4.95)$$

Аналогично можно получить модель внешнего смешивания для полной яркости (ЕТ от англ. «*external total*»). Из рассмотрения (4.62) и (4.79) следует, что $\mathcal{I}(0)$ является решением уравнения переноса для чистого неба при параметрах σ_{ext}^0 , $\sigma_{\text{sct}}^0 P_0$ и функции-источнике

$$J_{0\odot}^{\text{ET}} = \frac{F_\odot}{4\pi} \sigma_{\text{sct}}^0 P_0 e^{-\tau_{0\text{ext}}^\odot}, \quad \tau_{0\text{ext}}^\odot = \frac{1}{\mu_\odot} \int_z^{z_t} \sigma_{\text{ext}}^0 dz'. \quad (4.96)$$

Аналогично, $\mathcal{I}(1)$ является решением для облачной атмосферы при параметрах $\sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}$, $\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1$ и функции-источнике

$$J_{1\odot}^{\text{ET}} = \frac{F_\odot}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \sigma_{\text{sct}}^{\text{ld}} P_1) e^{-\tau_{1\text{ext}}^\odot}, \quad \tau_{1\text{ext}}^\odot = \frac{1}{\mu_\odot} \int_z^{z_t} (\sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^{\text{ld}}) dz'. \quad (4.97)$$

Воспринимая \bar{f} в качестве параметра облачности A_c , становится очевидно, что для разорванной облачности модель внешнего смешивания для полной яркости это в точности модель линейного смешивания (4.57). Модели внутреннего смешивания отличаются от моделей внешнего смешивания функцией источников.

Сделаем следующее замечание. В приведенных выкладках ключевым моментом было построение случайного поля яркости \mathcal{I} , которое является решением одномерного уравнения переноса, причем $\bar{\mathcal{I}} = \bar{I}$. Однако такое построение не единственно. Поэтому можно сформулировать другие модели внешнего смешивания. Например, пусть I_0 и I_1 – две детерминистические функции, которые являются решениями следующих краевых задач:

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_0}{dz} &= -(\sigma_{\text{ext}}^0 + \chi_0 \sigma_{\text{ext}}^{\text{1d}}) I_0 + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \chi_0 \sigma_{\text{sct}}^{\text{1d}} P_1) I_0 d\Omega' \\ &\quad + \frac{F_0}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \chi_0 \sigma_{\text{sct}}^{\text{1d}} P_1) \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} \\ I_{0-} &= 0, \quad z = z_t \\ I_{0+} &= \frac{A}{\pi} F_\odot |\mu_\odot| \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} + \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| I_{0-} d\Omega, \quad z = z_s \end{aligned} \quad (4.98)$$

и

$$\begin{aligned} \mu \frac{dI_1}{dz} &= -(\sigma_{\text{ext}}^0 + \chi_1 \sigma_{\text{ext}}^{\text{1d}}) I_1 + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \chi_1 \sigma_{\text{sct}}^{\text{1d}} P_1) I_1 d\Omega' \\ &\quad + \frac{F_\odot}{4\pi} (\sigma_{\text{sct}}^0 P_0 + \chi_1 \sigma_{\text{sct}}^{\text{1d}} P_1) \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} + \frac{F_\odot}{4\pi} \sigma_{\text{sct}}^{\text{1d}} P_1 \frac{1}{\bar{f}} \overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot})} \\ I_{1-} &= 0, \quad z = z_t \\ I_{1+} &= \frac{A}{\pi} F_\odot |\mu_\odot| \overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^\odot}} + \frac{A}{\pi} \int_{2\pi} |\mu| I_{1-} d\Omega, \quad z = z_s, \end{aligned} \quad (4.99)$$

соответственно, где

$$\chi_0 = \frac{\bar{f} - \bar{f}^2}{1 - \bar{f}}, \quad \chi_1 = 1 - \frac{\bar{f} - \bar{f}^2}{\bar{f}} = \frac{\bar{f}^2}{\bar{f}}.$$

Далее, введем случайное поле \mathcal{I} с помощью функции-индикатора f через соотношение $\mathcal{I} = (1 - f) I_0 + f I_1$. Так как I_0 и I_1 по определению детерминистические, то среднее значение \mathcal{I} можно вычислить как $\bar{\mathcal{I}} = (1 - \bar{f}) I_0 + \bar{f} I_1$. При этом $\bar{\mathcal{I}} = \bar{I}$. Функции I_0 и I_1 являются решениями уравнений (4.98) и (4.99), в которых коэффициенты экстинкции являются линейными комбинациями σ_{ext}^0 и $\sigma_{\text{ext}}^{\text{1d}}$. Соответствующие весовые коэффициенты следуют из статистики для f . Определим относительное среднеквадратичное отклонение для f как $c_f = \sqrt{f'^2/\bar{f}}$.

Тогда χ_0 и χ_1 будут иметь вид

$$\chi_0 = \frac{\bar{f}}{1 - \bar{f}} [1 - (1 + c_f^2) \bar{f}], \quad \chi_1 = (1 + c_f^2) \bar{f}.$$

Если $c_f^2 \leq 1/\bar{f} - 1$, то $0 \leq \chi_0 \leq 1$ и $0 \leq \chi_1 \leq 1$. Если $\bar{f} \rightarrow 1$, то необходимо, чтобы $c_f \rightarrow 0$, то есть, чтобы $\bar{f}'^2 \rightarrow 0$. Для модели разорванной облачности из $f^2 = f$ следует, что $\chi_0 = 0$ и $\chi_1 = 1$. В результате мы получаем такую же модель внешнего смешивания для диффузной части, как и раньше.

4.5 Численное сравнение моделей

Рассмотрим модель разорванной облачности в одномерном случае. Верхняя граница атмосферы находится на высоте $h = 10$ км. В модель атмосферы включены озон и слой облака. Детерминистический коэффициент экстинкции для облака определен функцией (4.36), геометрическая толщина облака $\Delta h = h_2 - h_1 = 1$ км, альбеда однократного рассеяния облака $\omega_1 = 0.9$, используется индикатриса рассеяния Henyey–Greenstein с параметром асимметрии $g_1 = 0.85$. Вычисления выполнены для единичного солнечного потока.

Модель облака аналогична модели, описанной в части 4.3, за исключением следующих параметров: $\Delta x = 0.1$ км, $l = N_x \Delta x = 6.4$ км. В качестве «эталонной» модели используется SHDOM. Расчеты выполнены для периодических граничных условий. Для расчета средней яркости выполняется усреднение по ансамблю и координате 200 реализаций функции-индикатора f вдоль оси x . Величины $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$ и $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'}$ вычисляются аналогично. Вычисления выполняются только для слоя облака, с тем чтобы уменьшить время счета, как описано в части 4.3.2. Это упрощение является точным для $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$, но не точным для $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'(z)}$ для области под облаком, то есть при $z < h_1$.

В сравнении также участвует стохастическая модель. Вычисления выполнены для различных значений угла падения θ_{\odot} , верхней границы облака h_2 , оптической толщины облака $\tau_1 = \sigma_c \Delta h$ и альбеда поверхности A . Для удобства эти параметры собраны в векторе $\mathbf{b} = [\theta_{\odot}, h_2, \tau_1, A]$.

На рисунке 4.14 показаны средние значения яркости на верхней границе атмосферы как функция угла визирования θ : $\bar{\mathcal{I}}(h, \theta, \mathbf{b}_0)$ для приближенных моделей и $\bar{I}_{\text{SH}}(h, \theta, \mathbf{b}_0)$, рассчитанные с помощью SHDOM. При расчете в моделях внутреннего смешивания $\eta = 1$ и

$$\mathbf{b}_0 = [\theta_{\odot} = 30^\circ, h_2 = 5 \text{ km}, \tau_1 = 8, A = 0.2].$$

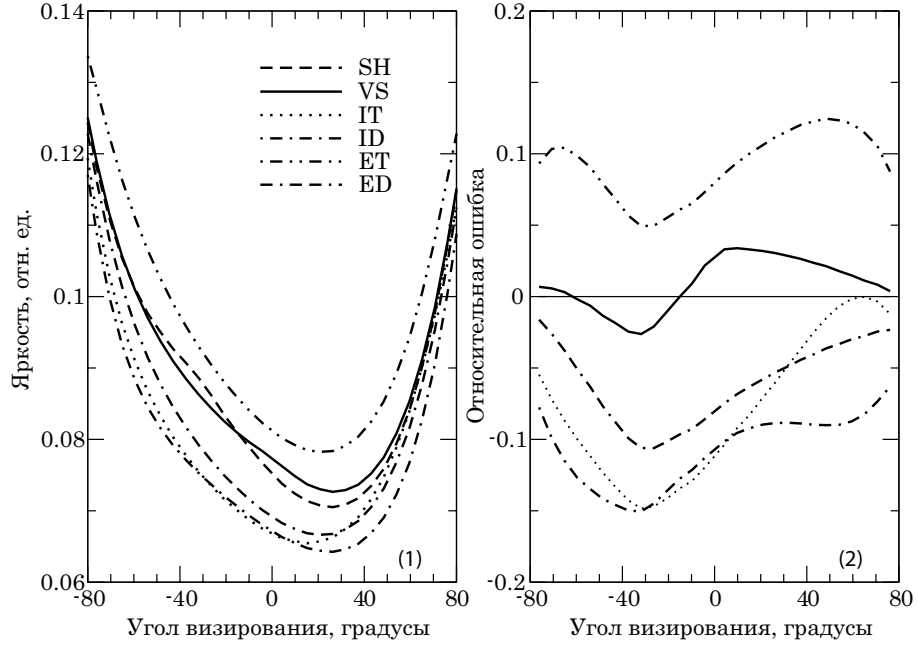


Рисунок 4.14 — (1) Средняя яркость на верхней границе атмосферы как функция угла визирования; (2) Относительная ошибка средней яркости как функция угла визирования. Приведены результаты для SHDOM (SH), стохастической модели (VS), модели внутреннего смешивания для полной (IT) и диффузионной (ID) части яркости, модели внешнего смешивания для полной (ET) и диффузионной (ID) части яркости. Вероятность заполнения $p = 0.5$.

Относительная ошибка, определенная как

$$\varepsilon(\theta, \mathbf{b}_0) = |\bar{\mathcal{I}}(h, \theta, \mathbf{b}_0) - \bar{I}_{\text{SH}}(h, \theta, \mathbf{b}_0)| / \bar{I}_{\text{SH}}(h, \theta, \mathbf{b}_0), \quad (4.100)$$

показана на рисунке 4.14 справа.

Углы визирования находятся в диапазоне $-80^\circ < \theta < 80^\circ$, причем положительное значение θ соответствует азимуту $\varphi = 0^\circ$, а отрицательные значения соответствуют азимуту $\varphi = 180^\circ$. Угловое разрешение $\Delta\theta = 1^\circ$. Из приведенных графиков следует, что модель внешнего смешивания для полной яркости ошибается в большую сторону, а остальные модели — в меньшую. Стохастическая модель иногда ошибается в большую сторону, иногда в меньшую. При этом ошибка стохастической модели минимальна. Также видно, что $\bar{\mathcal{I}}_{\text{ID}} < \bar{\mathcal{I}}_{\text{IT}}$, из чего можно сделать вывод, что $J_{\odot}^{\text{ID}} < J_{\odot}^{\text{IT}}$ ⁹.

⁹Кроме того, можно сделать вывод, что отрицательная корреляция, приводящая к меньшим средним коэффициентам экстинкции, уменьшает относительную ошибку.

4.5.1 Модели внутреннего смешивания

Оптимальное значение коэффициента корреляции найдем как

$$\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}(\mathbf{b}) = \arg \min_{\eta} \|\bar{\mathcal{I}}(\eta, h, \theta, \mathbf{b}) - \bar{I}_{\text{SH}}(h, \theta, \mathbf{b})\|_{2\theta}. \quad (4.101)$$

На рисунке 4.15 показаны относительные ошибки средней яркости на верхней границе атмосферы, усредненной по углу визирования θ ,

$$\varepsilon(\eta, \mathbf{b}) = \|\bar{\mathcal{I}}(\eta, h, \theta, \mathbf{b}) - \bar{I}_{\text{SH}}(h, \theta, \mathbf{b})\|_{2\theta} / \|\bar{I}_{\text{SH}}(h, \theta, \mathbf{b})\|_{2\theta}, \quad (4.102)$$

при $\mathbf{b} = \mathbf{b}_0$. Графики соответствуют модели внутреннего смешивания для диффузионной части с постоянной корреляцией (4.66), для полной яркости с постоянной корреляцией (4.68) и корреляцией, зависящей от угла (4.75). Все кривые имеют единственные минимумы. Чем ближе вероятность заполнения p к 1, тем ближе максимум к 1 на оси абсцисс. На рисунке 4.16 показана минимальная относительная ошибка $\varepsilon(\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}, \mathbf{b}_0)$ для указанных моделей. Из приведенных графиков следует, что модель внутреннего смешивания для диффузионной части имеет наименьшую ошибку, а модель внутреннего смешивания для полной яркости с корреляцией, зависящей от угла, наибольшую. Из чего можно сделать вывод, что допущение (4.75), которое было сделано для ускорения вычислений, не так реалистично, как допущение (4.74). Оптимальные значения коэффициента корреляции $\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}$ увеличиваются с ростом p и близки к коэффициентам корреляции для модели с постоянной корреляцией.

Расчет коэффициента $\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}$ в многомерной модели является очень трудоемкой задачей. Принимая во внимание (4.89), понятно, что вычисление коэффициента $\eta_{\text{ETA}}^{\alpha}$ в (4.88) и в (4.90) также требует много времени. Поэтому в качестве «эталонного» решения вместо SHDOM будем использовать стохастическую модель:

$$\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}(\mathbf{b}) = \arg \min_{\eta} \|\bar{\mathcal{I}}(\eta, h, \theta, \mathbf{b}) - \bar{I}_{\text{VS}}(h, \theta, \mathbf{b})\|_{2\theta}. \quad (4.103)$$

На рисунке 4.17 показаны относительные ошибки $\varepsilon(\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}, \mathbf{b})$, $\varepsilon(\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}, \mathbf{b})$, $\varepsilon(\eta_{\text{ETA}}, \mathbf{b})$ и $\varepsilon(\eta_{\text{ETA}}^{\alpha}, \mathbf{b})$, а также значения $\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}(\mathbf{b})$, $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}(\mathbf{b})$, $\eta_{\text{ETA}}(\tau_1)$ и $\eta_{\text{ETA}}^{\alpha}(\tau_1)$ для «номинального» вектора \mathbf{b}_0 и других

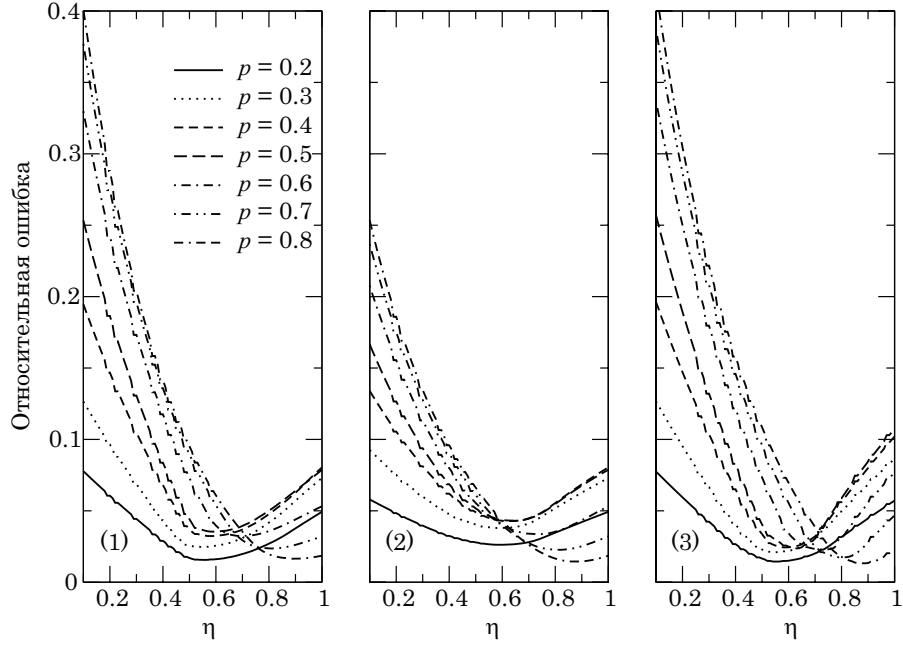


Рисунок 4.15 — Относительные ошибки средней яркости на верхней границе атмосферы, усредненной по углу визирования θ для различных значений вероятности заполнения p : (1) модель внутреннего смешивания для полной яркости с постоянной корреляцией; (2) то же, но с угловой корреляцией; (3) для диффузионной части с постоянной корреляцией.

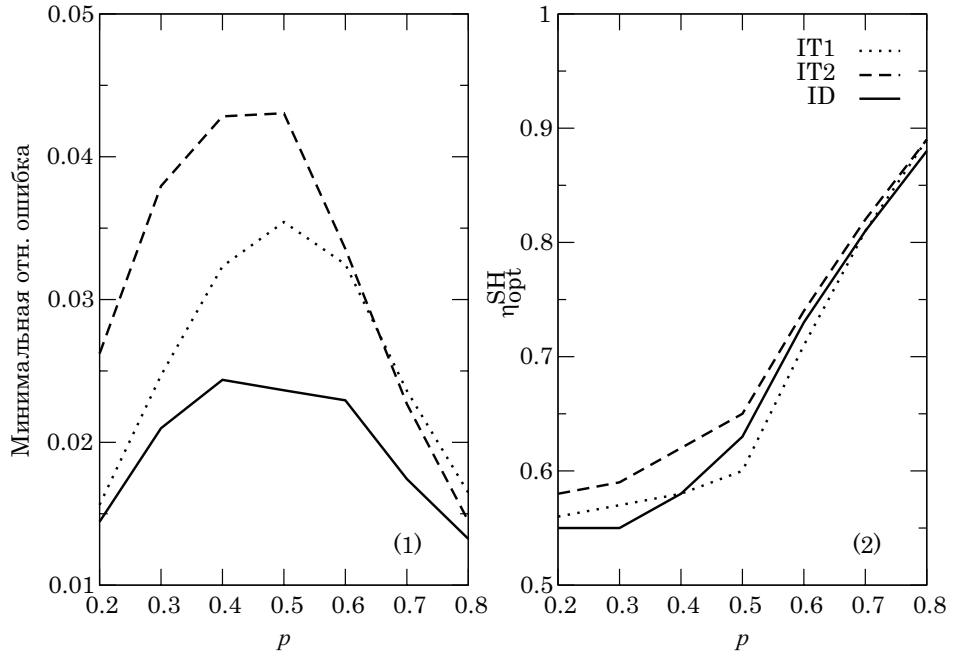


Рисунок 4.16 — Минимальные относительные ошибки $\varepsilon(\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}, \mathbf{b}_0)$ и оптимальные значения коэффициента корреляции $\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}(\mathbf{b}_0)$ для моделей внутреннего смешивания: IT1 соответствует модели с постоянной корреляцией, IT2 — с переменной корреляцией.

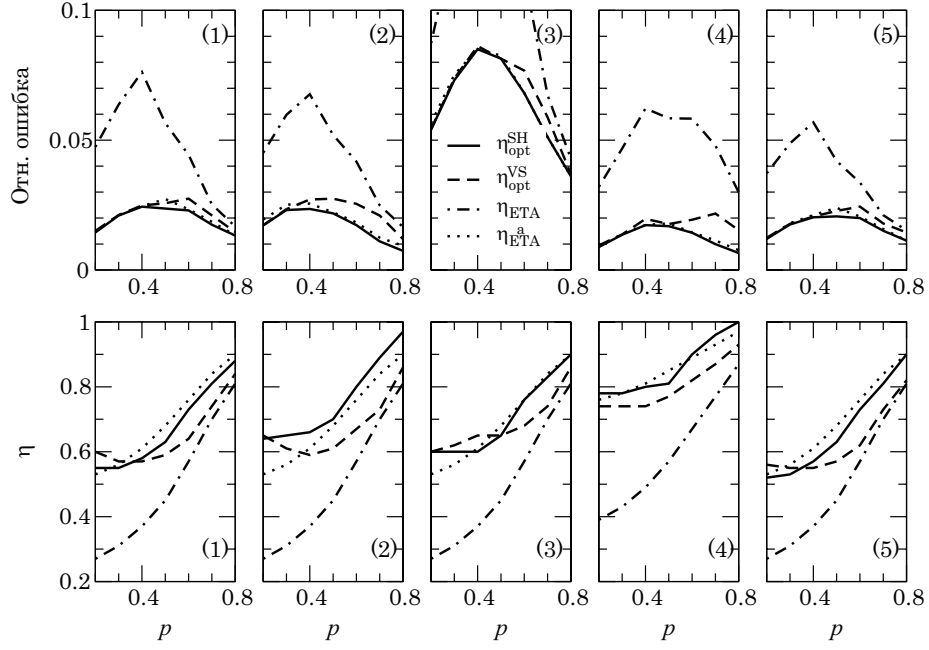


Рисунок 4.17 — Относительные ошибки $\varepsilon(\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}, \mathbf{b})$, $\varepsilon(\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}, \mathbf{b})$, $\varepsilon(\eta_{\text{ETa}}, \mathbf{b})$ и $\varepsilon(\eta_{\text{ETa}}^{\alpha}, \mathbf{b})$ (сверху) и значения $\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}(\mathbf{b})$, $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}(\mathbf{b})$, $\eta_{\text{ETa}}(\tau_1)$ и $\eta_{\text{ETa}}^{\alpha}(\tau_1)$ (снизу) для различных значений вероятности заполнения p и векторов: (1) $\mathbf{b} = \mathbf{b}_0$, (2) $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1$, (3) $\mathbf{b} = \mathbf{b}_2$, (4) $\mathbf{b} = \mathbf{b}_3$, (5) $\mathbf{b} = \mathbf{b}_4$.

векторов:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= [\theta_{\odot} = 60^{\circ}, h_2 = 5 \text{ км}, \tau_1 = 8, A = 0.2], \\ \mathbf{b}_2 &= [\theta_{\odot} = 30^{\circ}, h_2 = 9 \text{ км}, \tau_1 = 8, A = 0.2], \\ \mathbf{b}_3 &= [\theta_{\odot} = 30^{\circ}, h_2 = 5 \text{ км}, \tau_1 = 4, A = 0.2], \\ \mathbf{b}_4 &= [\theta_{\odot} = 30^{\circ}, h_2 = 5 \text{ км}, \tau_1 = 8, A = 0.1]. \end{aligned}$$

Коэффициенты η_{ETa} и $\eta_{\text{ETa}}^{\alpha}$ вычислены по формулам (4.87) и (4.88), соответственно. Решение задачи оптимизации (4.89): $\alpha_{\text{opt}} = 0.25$ при $\tau_1 = 8$ и $\alpha_{\text{opt}} = 0.15$ при $\tau_1 = 4$. На графиках видно, что η_{ETa} содержит большую ошибку, а коэффициент $\eta_{\text{ETa}}^{\alpha}$ достаточно близко расположен к $\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}$ для всех \mathbf{b} (хотя α_{opt} вычислен для $\mathbf{b} = \mathbf{b}_0$). С другой стороны, совпадение $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}$ и $\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}$ достаточно хорошее, относительные ошибки $\varepsilon(\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}, \mathbf{b})$ не намного больше, чем $\varepsilon(\eta_{\text{opt}}^{\text{SH}}, \mathbf{b})$.

На рисунке 4.18 показаны значения $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}(\mathbf{b})$ для различных \mathbf{b} . Видно, что $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}$ сильно зависит от τ_1 , умеренно от h_2 , и слабо от θ_{\odot} и A . Это обстоятельство приводит к мысли о том, что по аналогии с $\eta_{\text{ETa}}^{\alpha}$ возможно упростить расчет $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}$, если рассчитывать только $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}} = \eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}(\tau_1)$, а параметры θ_{\odot} , h_2 и A заменить некоторыми «эталонными» значениями.

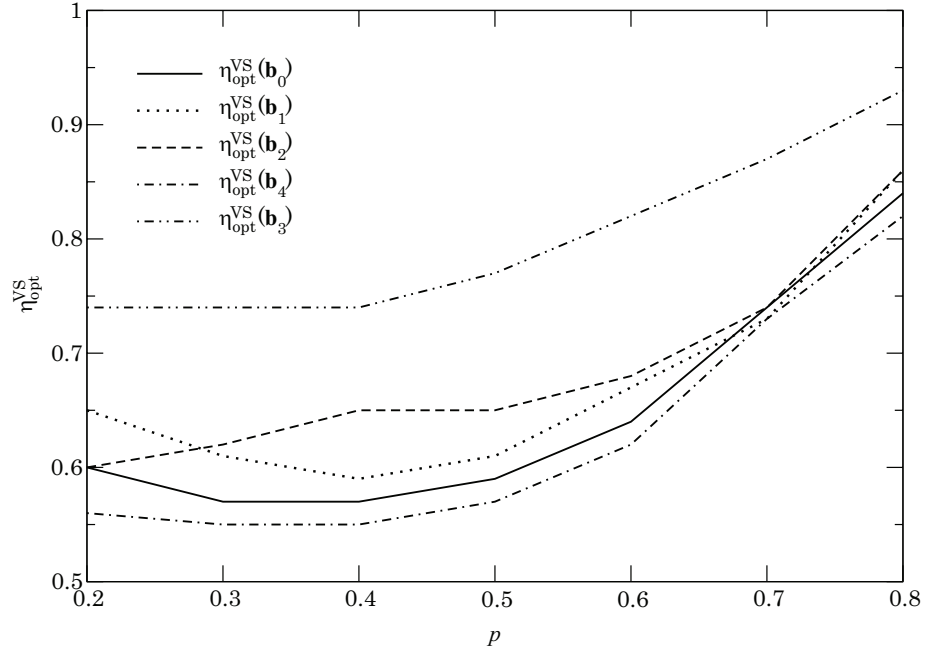


Рисунок 4.18 — Значения $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}$ при разных значениях вероятности заполнения и векторов \mathbf{b} .

4.5.2 Модели внутреннего и внешнего смешивания

Проанализируем точность моделей внутреннего и внешнего смешивания. Для модели внутреннего смешивания предположим, что $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}$ зависит только от оптической толщины облака, то есть $\eta_{\text{opt}}^{\text{VS}} = \eta_{\text{opt}}^{\text{VS}}(\tau_1)$. На рисунках 4.19, 4.20 и 4.21 показаны относительные ошибки $\varepsilon(\mathbf{b})$, рассчитанные по формуле (4.102) для нескольких векторов \mathbf{b} . В таблице 4.3 приведены их максимальные значения. Можно сделать следующие выводы:

1. Из рассмотренных приближенных моделей стохастическая модель является самой точной.
2. Точность моделей смешивания для диффузной части яркости выше, чем точность моделей смешивания для полной яркости, так как в первой прямое солнечное излучение рассчитывается в многомерной модели.
3. Модели внутреннего смешивания более точные, чем модели внешнего смешивания, так как первые являются параметризацией «эталонной» модели.

Отметим, что $\varepsilon_{\text{VS}} \leq 5\%$, $\varepsilon_{\text{ID}} \leq 9\%$, $\varepsilon_{\text{IT}} \leq 10\%$, $\varepsilon_{\text{ED}} \leq 15\%$, и $\varepsilon_{\text{ET}} \leq 21\%$. Ошибка тем больше, чем ближе облако расположено к верхней границе атмосферы. В этом случае даже стохастическая модель имеет ошибку $\sim 5\%$, из-за того, что с погрешностью вычисляется $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'}'$ под облаком.

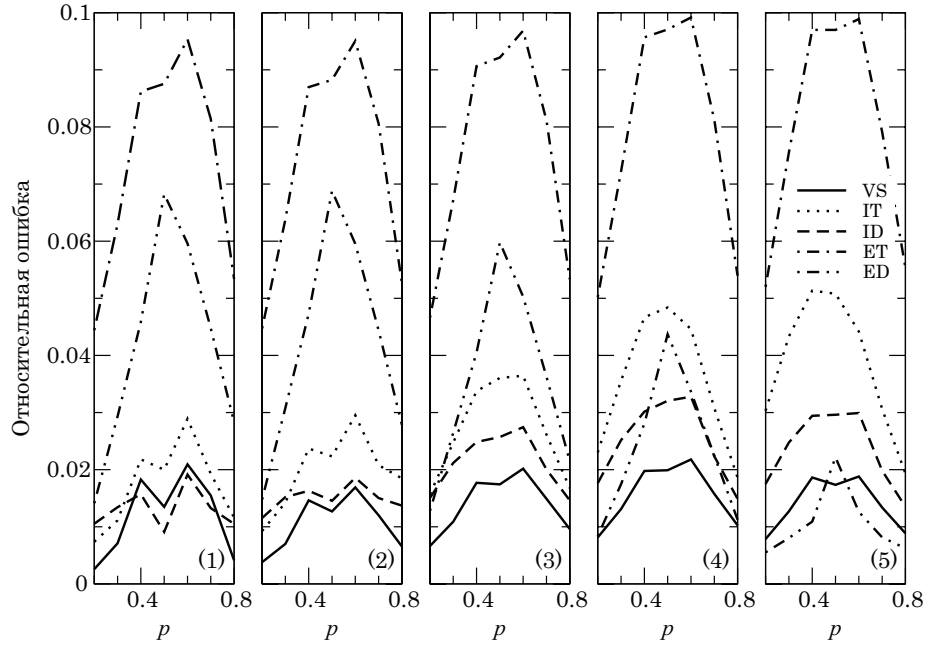


Рисунок 4.19 — Относительные ошибки $\varepsilon(\mathbf{b})$ для \mathbf{b} , в котором θ_{\odot} принимает значения: (1) $\theta_{\odot} = 0^\circ$, (2) $\theta_{\odot} = 15^\circ$, (3) $\theta_{\odot} = 30^\circ$, (4) $\theta_{\odot} = 45^\circ$, и (5) $\theta_{\odot} = 60^\circ$. Остальные компоненты \mathbf{b} : $h_2 = 5$ км, $\tau_c = 8$, и $A = 0.2$.

Также сделаем выводы насчет скорости вычислений:

1. Модели внешнего смешивания медленнее моделей внутреннего смешивания, так как требуют решения двух плоско-параллельных задач.
2. Модели смешивания для диффузной части медленнее моделей для полной яркости, так как $\overline{e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}}}$ и $\overline{f'(e^{-\tau_{\text{ext}}^{\odot}})'}$ рассчитываются в трехмерной геометрии с помощью усреднения по координатам и ансамблю.

Таким образом, наиболее приемлемой моделью с практической точки зрения является модель внутреннего смешивания для полной яркости, так как она не требует расчетов в 2D/3D геометриях.

Подводя итог представленному анализу, отметим ряд основных моментов. В рамках стохастической теории переноса из стохастической модели нулевого порядка были получены приближенные модели внутреннего и внешнего смешивания для диффузной части излучения и полной яркости. В моделях для диффузной части прямое солнечное излучение рассчитывается в трехмерной модели, что повышает точность расчета в целом. Модели внутреннего смешивания получены двумя способами. В первом способе модель была получена с помощью формулирования условия замыкания для ковариации между функцией яркости и функцией-индикатором. Ковариация может быть постоянной или зависеть от угла зондирования. Для

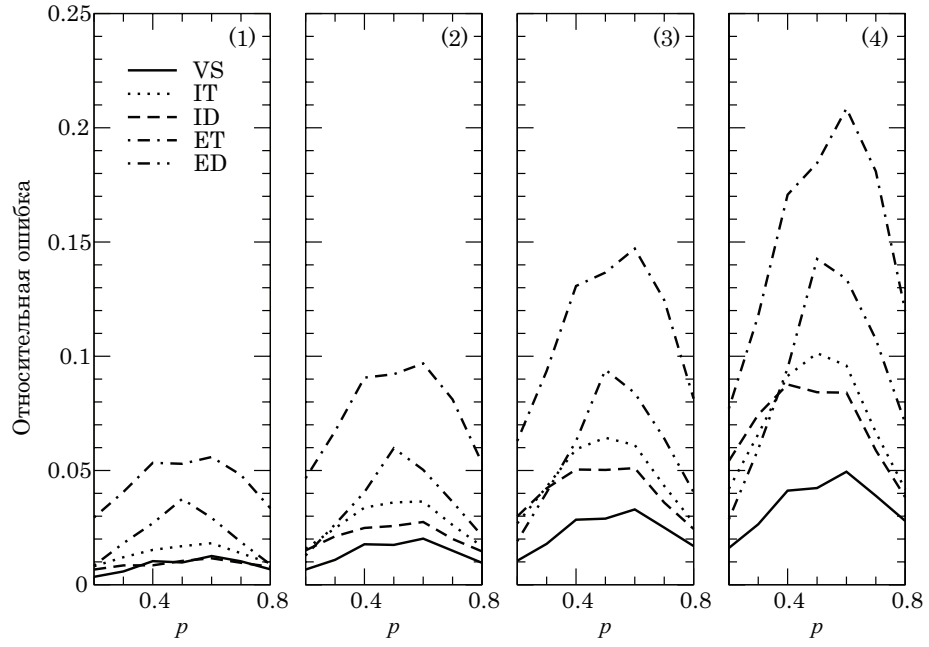


Рисунок 4.20 — Относительные ошибки $\varepsilon(\mathbf{b})$ для \mathbf{b} , в котором h_2 принимает значения: (1) $h_2 = 3$ км, (2) $h_2 = 5$ км, (3) $h_2 = 7$ км, и (4) $h_2 = 9$ км. Остальные компоненты \mathbf{b} : $\theta_{\odot} = 30^\circ$, $\tau_c = 8$, и $A = 0.2$.

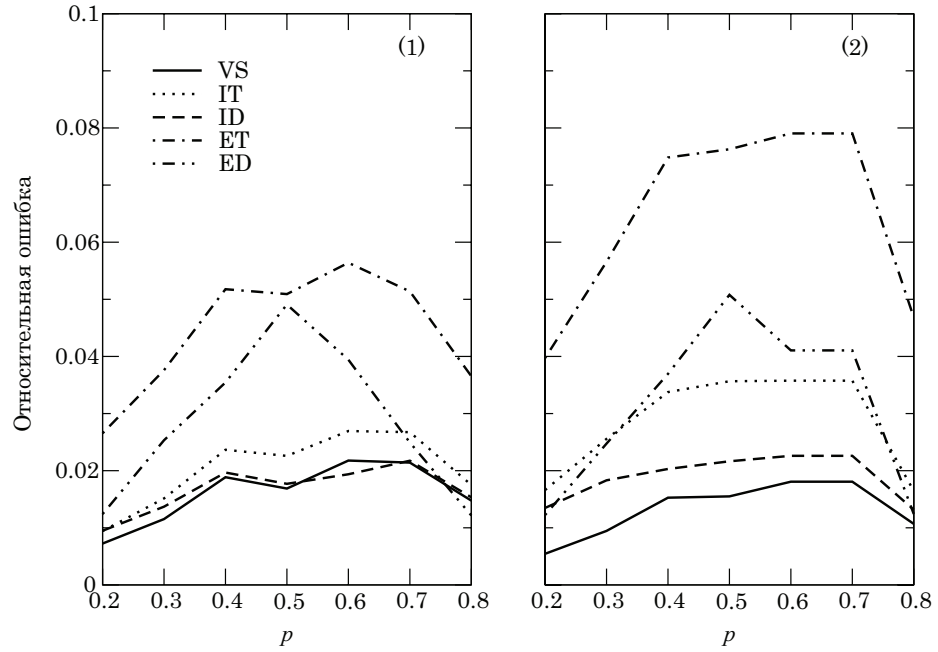


Рисунок 4.21 — Относительные ошибки $\varepsilon(\mathbf{b})$ для (1) $\mathbf{b} = \mathbf{b}_3$ и (2) $\mathbf{b} = \mathbf{b}_4$.

Таблица 4.3 — Максимальная относительная ошибка для расчетов на рисунках 4.19, 4.20 и 4.21

Рисунок	Случай №	VS	IT	ID	ET	ED
4.19	(1)	2.09	2.89	1.91	9.53	6.82
	(2)	1.68	2.95	1.85	9.50	6.88
	(3)	2.01	3.64	2.74	9.68	5.97
	(4)	2.17	4.83	3.27	9.91	4.36
	(5)	1.87	5.13	2.99	9.88	2.21
4.20	(1)	1.25	1.81	1.15	5.58	3.75
	(2)	2.01	3.64	2.74	9.68	5.97
	(3)	3.29	6.43	5.10	14.70	9.41
	(4)	4.94	9.58	8.76	20.84	14.25
4.21	(1)	2.17	2.69	1.96	5.63	4.90
	(2)	1.80	3.57	2.26	7.90	5.07

уменьшения расхождения между приближенной моделью и эталонной моделью вводится поправочный коэффициент (который был назван коэффициентом корреляции). Поэтому модель внутреннего смешивания является параметризацией эталонной модели. Второй способ основан на введении такой функции яркости, которая является решением уравнения переноса с функцией источников, рассчитываемой в трехмерной модели. Такое «искусственное» решение имеет важное свойство: стохастическая модель нулевого порядка для неё совпадает со стохастической моделью нулевого порядка для исходной функции яркости. Благодаря этому факту была получена новая параметризация коэффициента корреляции в приближении эффективной толщины; сформулирован аналог приближения независимых столбов в стохастической теории переноса; получены модели внешнего смешивания как аналоги модели линейного смешивания для разорванной облачности. Параметризация (4.88) является обобщением приближения эффективной толщины на произвольную статистику облака, включая случай разорванной облачности. Важным является также и то, что для ускорения вычислений в качестве эталонного решения было принято решение не многомерной, а стохастической задачи. Таким образом, не составляет труда рассчитать справочные таблицы для коэффициента корреляции для реальных облаков.

Результаты Главы 4

1. Построена стохастическая модель n -ого порядка для произвольной статистики облака. Стохастическая модель имеет матричную форму записи. В случае разорванной облачности модель n -ого порядка сводится к модели первого порядка для вектора яркости,

состоящего из двух компонент: средней яркости и ковариации яркости и функции-индикатора, описывающего статистику облака. Алгоритм решения соответствующего уравнения переноса аналогичен решению векторного уравнения переноса.

2. Полученная стохастическая модель эквивалентна модели, основанной на уравнениях Levermore-Pomraning, которая сформулирована через средние значения яркости в каждом из материалов (сред). Таким образом, стохастическая модель n -ого порядка является обобщением модели Levermore-Pomraning на произвольную статистику среды.
3. Из стохастической модели были получены модели внутреннего и внешнего смешивания для диффузной части и для полной яркости.
4. Для атмосферы с разорванной облачностью модели внутреннего смешивания более быстрые и точные, чем модели внешнего смешивания, а модели смешивания для диффузной части излучения более точные, но менее быстрые, чем модели смешивания для полной яркости. Для использования на практике наиболее подходит модель внутреннего смешивания для полной яркости. Однако для неё необходимы заранее посчитанные таблицы коэффициентов корреляции между функцией-индикатором и функцией яркости.

ГЛАВА 5. Многомерная модель

5.1 Предварительные замечания

Как уже было отмечено в Главе 1, SHDOM [187] является одним из самых эффективных свободно распространяемых алгоритмов решения трехмерных скалярных задач, что обеспечивается тремя особенностями кода:

1. сочетанием метода дискретных ординат и метода сферических гармоник (распространение излучения рассчитывается с помощью представления функции яркости в дискретных ординатах, а интеграл рассеяния рассчитывается с помощью представления функции яркости через сферические функции: в каждом узле расчетной сетки хранятся коэффициенты разложения функции источников по сферическим функциям, что требует существенно меньше памяти, чем по дискретным ординатам);
2. разностной схемой, в которой предполагается линейная зависимость коэффициента экстинкции и произведения коэффициента экстинкции на функцию источников от пространственных координат вдоль характеристики;
3. адаптивной сеткой, повышающей точность решения с помощью увеличения пространственного разрешения расчетной сетки в тех областях, в которых функция источников меняется быстро.

Теоретические исследования метода характеристик для решения уравнения переноса были проведены Т.А.Сушкевич [213, 343]. Нашей же целью в этой Главе будет построение векторной, а также скалярной линеаризованной многомерной модели переноса излучения на базе SHDOM. Также, нашей задачей будет оценить времена счета с помощью многомерных алгоритмов. Мы начнем с анализа метода коротких характеристик и соответствующих разностных схем. Целью анализа является установление факторов, определяющих точность решения. В частности, практический интерес представляет использование интерполяционных схем высокого порядка. Затем мы рассмотрим векторную модель, полученную на основе SHDOM с помощью обобщенных сферических функций. И, наконец, мы рассмотрим метод нахождения матрицы Якоби от решения SHDOM.

5.2 Анализ метода коротких характеристик

5.2.1 Постановка задачи

Уравнение переноса излучения для диффузионной части в многомерном случае записывается в виде

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = -\sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}), \quad (5.1)$$

где $I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ – яркость в направлении $\boldsymbol{\Omega}$ в точке \mathbf{r} , σ_{ext} – коэффициент экстинкции и $J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ – функция источников. Направление рассеяния

$$\boldsymbol{\Omega} = \Omega_x \mathbf{i} + \Omega_y \mathbf{j} + \Omega_z \mathbf{k}$$

характеризуется зенитным и азимутальным углами θ и φ , соответственно, т.е., $\Omega_x = \sin \theta \cos \varphi$, $\Omega_y = \sin \theta \sin \varphi$, $\Omega_z = \cos \theta$. Далее используется обозначение $\boldsymbol{\Omega} = (\theta, \varphi)$. Предполагая, что функция источников содержит компоненту от прямого солнечного излучения и компоненту от многократного рассеяния, мы можем записать функцию источников в виде

$$J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{\omega(\mathbf{r})}{4\pi} P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_0) I_{\odot}(\mathbf{r}) + \frac{\omega(\mathbf{r})}{4\pi} \int_{4\pi} P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega', \quad (5.2)$$

где

$$I_{\odot}(\mathbf{r}) = F_0 \exp \left[- \int_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} \sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}') ds' \right], \quad (5.3)$$

$\boldsymbol{\Omega}_0 = (\theta_0, \varphi_0)$ – направление падающего излучения, \mathbf{r}_0 – точка на границе расчетной области, ω – альбедо однократного рассеяния, $P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}')$ – индикатриса рассеяния, в которой $\boldsymbol{\Omega}$ и $\boldsymbol{\Omega}'$ обозначают направления падающего и рассеянного излучения, соответственно. Далее произведение коэффициента экстинкции на функцию источников обозначим за $S = \sigma_{\text{ext}} J$.

Для последующего анализа мы рассмотрим двухмерный случай: расчетная область разбивается на прямоугольные элементы – ячейки. При этом значения параметров σ_{ext} , ω , P и I_{\odot} в узлах сетки предполагаются известными. Значения параметров внутри расчетной ячейки определяются с помощью двойной линейной интерполяции (линейной по каждому измерению). Рассмотрим произвольную ячейку шириной Δx и высотой Δz , так что $0 \leq x \leq \Delta x$ и $0 \leq z \leq \Delta z$, и выберем направление $\boldsymbol{\Omega}_p$, $\Omega_x^p > 0$ и $\Omega_z^p > 0$ (p – номер дискретной ординаты).

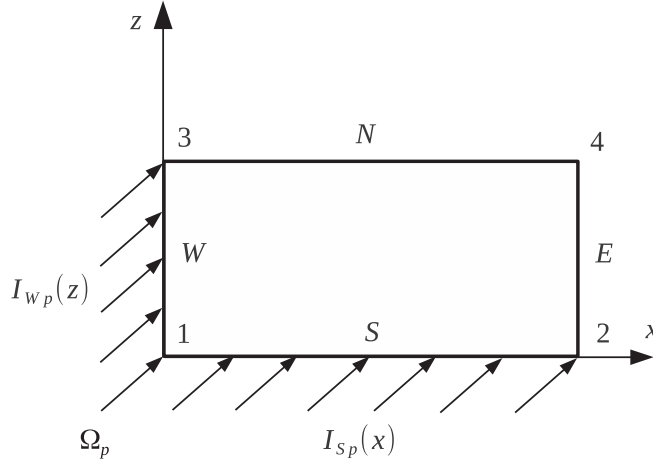


Рисунок 5.1 — Иллюстрация краевой задачи в двухмерном случае (5.4).

Краевая задача примет вид (см. рисунок 5.1)

$$\begin{cases} \Omega_x^p \frac{\partial I_p}{\partial x} + \Omega_z^p \frac{\partial I_p}{\partial z} + \sigma_{\text{ext}}(x, z) I_p(x, z) = S_p(x, z) \\ I_p(0, z) = I_{wp}(z), \quad I_p(x, 0) = I_{sp}(x) \end{cases} \quad (5.4)$$

Предположим, что нам известно решение $I(x, z)$ граничной задачи для всей расчетной области. Зная это решение, можно рассчитать значения S_p и значения функции яркости на границах W и S — $I_{wp}(z)$ и $I_{sp}(x)$:

$$S_p(x, z) = \frac{\omega}{4\pi} P(\Omega_p, \Omega_0) \sigma_{\text{ext}}(x, z) I_{\odot}(x, z) + \frac{\omega}{4\pi} \sum_{p'} w_{p'} P(\Omega_p, \Omega_{p'}) \sigma_{\text{ext}}(x, z) I_{p'}(x, z), \quad (5.5)$$

где w_p — веса квадратуры. Решение I_p задачи (5.4) равно решению для всей расчетной области в текущей ячейке. Введем функции \hat{S}_p , \hat{I}_{wp} и \hat{I}_{sp} как интерполанты функций S_p , I_{wp} и I_{sp} , соответственно. И пусть \hat{I}_p есть решение задачи (5.4), в которой вместо точных функций S_p , I_{wp} и I_{sp} используются \hat{S}_p , \hat{I}_{wp} и \hat{I}_{sp} . Очевидно, что точность приближения функции I_p функцией \hat{I}_p зависит от точности решения задачи (5.4) и точности интерполяции. Обычно решение определяется точно в узлах решетки. Интерполяция производится по значениям в узлах решетки. Решение же в остальных точках ячейки может содержать ошибку. Уменьшая размер ячейки, можно получить сходимость $\hat{I}_p \rightarrow I_p$, если $\Delta x \Delta z \rightarrow 0$ (а точнее, $\max(\Delta x, \Delta z) \rightarrow 0$). Краевая задача (5.4) решается итерационно. На текущей итерации интерполанты произведения коэффициента экстинкции на функцию источников определяются по значениям яркости, рассчитанным на предыдущей итерации, а интерполанты значений яркости на границе ячей-

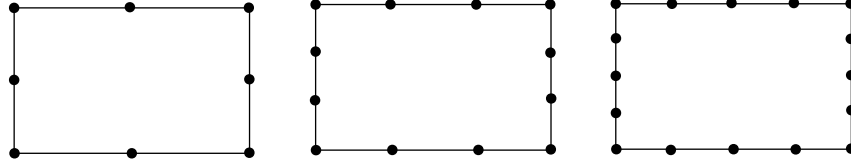


Рисунок 5.2 — Прямоугольные ячейки для интерполяционной схемы второго (слева), третьего (посередине) и четвертого (справа) порядков; точками обозначены узлы интерполяции.

ки определяются из значений яркости в соседних ячейках. Таким образом, функции \hat{S}_p , \hat{I}_{wp} и \hat{I}_{sp} известны, и краевую задачу (5.4) возможно решить.

Будем говорить, что разностная схема имеет порядок r (ячейка имеет порядок r), если при её построении используется интерполяционная схема порядка r . Интерполяционная схема для ячейки имеет вид

$$\hat{S}_p(x, z) = \sum_k Q_k^r(x, z) \hat{S}_p^k, \quad (5.6)$$

где Q_k^r — интерполяционные базисные функции порядка r и \hat{S}_p^k — значения \hat{S}_p в узлах решетки. Аналогично, для значений яркости на границах W и S мы имеем

$$\hat{I}_{wp}(z) = \sum_{k \in S_w} Q_k^r(0, z) \hat{I}_p^k, \quad \hat{I}_{sp}(x) = \sum_{k \in S_s} Q_k^r(x, 0) \hat{I}_p^k, \quad (5.7)$$

где суммирование производится по узлам принадлежащим границам W и S . Так как по нашему построению коэффициент экстинкции задан только в узлах расчетной сетки, для σ_{ext} возможно применить только линейную интерполяционную схему. Поэтому точность разностной схемы будет определяться степенью интерполяционной схемы для \hat{S}_p . Прямоугольные ячейки с порядком интерполяционной схемы выше первого показаны на рисунке 5.2. Выражения для интерполяционных функций приведены в Приложении А. Если известны значения яркости \hat{I}_p^k в узлах для всех направлений дискретных ординат p , то выражение для произведения коэффициента экстинкции на функцию источников \hat{S}_p^k в узлах сетки может быть записано как

$$\hat{S}_p^k = \frac{\omega_k}{4\pi} P_k(\Omega_p, \Omega_0) \sigma_{\text{ext}}^k I_{\odot}^k + \frac{\omega_k}{4\pi} \sum_{p'} w_{p'} P_k(\Omega_p, \Omega_{p'}) \sigma_{\text{ext}}^k \hat{I}_{p'}^k. \quad (5.8)$$

С учетом (5.8) очевидно, что уравнение (5.5) выполняется в узлах ячейки. Разностная схема порядка r использует значения яркости только в интерполяционных узлах ячейки и не требует дополнительной информации о поле яркости внутри ячейки.

Интегрируя уравнение (5.4) по ячейке, мы получаем уравнение баланса для прямоугольного элемента

$$\Omega_x^p \frac{\widehat{I}_p^E - \widehat{I}_p^W}{\Delta x} + \Omega_z^p \frac{\widehat{I}_p^N - \widehat{I}_p^S}{\Delta z} + \overline{\sigma_{\text{ext}} \widehat{I}_p} = \widehat{S}_p, \quad (5.9)$$

где \widehat{I}_p^W и \widehat{I}_p^E – усредненные по границам W и E значения яркости

$$\widehat{I}_p^W = \frac{1}{\Delta z} \int_0^{\Delta z} \widehat{I}_p(0, z) dz, \quad \widehat{I}_p^E = \frac{1}{\Delta z} \int_0^{\Delta z} \widehat{I}_p(\Delta x, z) dz, \quad (5.10)$$

\widehat{I}_p^S и \widehat{I}_p^N – усредненные по границам S и N значения яркости

$$\widehat{I}_p^S = \frac{1}{\Delta x} \int_0^{\Delta x} \widehat{I}_p(x, 0) dx, \quad \widehat{I}_p^N = \frac{1}{\Delta x} \int_0^{\Delta x} \widehat{I}_p(x, \Delta z) dx \quad (5.11)$$

и $\overline{\sigma_{\text{ext}} \widehat{I}_p}$ – усредненное по ячейке произведение коэффициента экстинкции на функцию яркости

$$\overline{\sigma_{\text{ext}} \widehat{I}_p} = \frac{1}{\Delta x \Delta z} \int_0^{\Delta z} \int_0^{\Delta x} \sigma_{\text{ext}}(x, z) \widehat{I}_p(x, z) dx dz. \quad (5.12)$$

Разностная схема, для которой выполняется уравнение баланса, называется консервативной. Далее мы будем обозначать за \overline{X} усредненное значение свойства X , аналогично (5.12) для $\sigma_{\text{ext}} \widehat{I}_p$.

Для анализа разностной схемы порядка r предположим, что мы можем рассчитать не только значения яркости в узлах \widehat{I}_p^k , но и получить решение \widehat{I}_p краевой задачи (5.4) с приемлемой точностью.

Точность разностной схемы порядка r определяется ошибками двух видов:

1. Ошибка интерполяции на границе. Так как значения яркости на границах E и N служат граничными условиями для следующих смежных ячеек, выражение для интерполяции (5.7) требует, чтобы $\widehat{I}_p(\Delta x, z)$ и $\widehat{I}_p(x, \Delta z)$ были полиномами степени r . По крайней мере в среднем должны выполняться соотношения:

$$\widehat{I}_p^E = \overline{\sum_{k \in S_E} Q_k^r(\Delta x, z) \widehat{I}_p^k}, \quad \widehat{I}_p^N = \overline{\sum_{k \in S_N} Q_k^r(x, \Delta z) \widehat{I}_p^k}, \quad (5.13)$$

где усредненные по границе значения яркости \widehat{I}_p^E и \widehat{I}_p^N вычислены с помощью (5.10) и (5.11), соответственно. На практике уравнения (5.13) выполняются приближенно. Вводя δ_{ip}^E и δ_{ip}^N как абсолютные значения невязки этих уравнений, мы определяем ошибку

интерполяции вдоль границы как

$$\varepsilon_{ip} = \sqrt{\left(\frac{\delta_{ip}^E}{\widehat{I}_p^E}\right)^2 + \left(\frac{\delta_{ip}^N}{\widehat{I}_p^N}\right)^2}.$$

2. Ошибка в сохранении потока (ошибка баланса). Если \widehat{I}_p является решением краевой задачи (5.4), то справедливо уравнение баланса (5.9), где

$$\widehat{I}_p^W = \overline{\sum_{k \in S_W} Q_k^r(0, z) \widehat{I}_p^k}, \quad \widehat{I}_p^S = \overline{\sum_{k \in S_S} Q_k^r(x, 0) \widehat{I}_p^k},$$

Однако расчет средних значений яркости на границах E и N с применением интерполяции (см. правые части уравнений (5.13)) нарушает сохранение потока. Абсолютная невязка уравнения баланса δ_{cp} имеет вид

$$\delta_{cp} = \Omega_x^p \frac{\delta_{ip}^E}{\Delta x} + \Omega_z^p \frac{\delta_{ip}^N}{\Delta z}. \quad (5.14)$$

Тогда ошибка в сохранении потока определяется как $\varepsilon_{cp} = |\delta_{cp}| / \widehat{S}_p$.

Таким образом, ошибка интерполяции на границе является мерой отклонения решения краевой задачи (5.4) от значений, полученных с применением интерполяционной схемы порядка r вдоль границ расчетной области. Ошибка сохранения потока является прямым следствием этой ошибки. Будем называть схему консервативной, если она гарантирует выполнение (5.9), и согласованной, если усредненные по границе ячейки значения яркости определяются точно от ячейки к ячейке. Условие согласованности является более сильным требованием, чем условие консервативности.

5.3 Разностные схемы в методе коротких характеристик

В этом разделе мы рассмотрим особенности различных разностных схем метода коротких характеристик и опишем подход для вычисления ошибок интерполяции и баланса.

5.3.1 Разностная схема нулевого порядка

В схеме нулевого порядка оптические свойства постоянны по ячейке, при этом используется кусочно-постоянная схема интерполяции. Произведение коэффициента экстинкции на

функцию источников в ячейке всюду приравнено усредненному по ячейке значению, а значения яркости на границах ячейки приравнены к средним значениям на соответствующих границах, т.е. $\hat{S}_p(x, z) = \bar{S}_p$, $\hat{I}_{wp}(z) = \hat{I}_p^w$ и $\hat{I}_{sp}(x) = \hat{I}_p^s$. Подлежащими определению величинами являются усредненные значения яркости на границе E \hat{I}_p^E , на границе N \hat{I}_p^N и усредненное по ячейке значение яркости $\bar{\hat{I}}_p$. Величина $\bar{\hat{I}}_p$ рассчитывается из уравнения баланса (5.9), в котором $\bar{\hat{S}}_p = \bar{S}_p$, $\overline{\sigma_{\text{ext}} \hat{I}_p} = \bar{\sigma}_{\text{ext}} \bar{\hat{I}}_p$, а \bar{S}_p рассчитывается как

$$\bar{S}_p = \frac{\bar{\omega}}{4\pi} \bar{P}(\mathbf{\Omega}_p, \mathbf{\Omega}_0) \bar{\sigma}_{\text{ext}} \bar{I}_{\odot} + \frac{\bar{\omega}}{4\pi} \sum_{p'} w_{p'} \bar{P}(\mathbf{\Omega}_p, \mathbf{\Omega}_{p'}) \bar{\sigma}_{\text{ext}} \bar{\hat{I}}_{p'}. \quad (5.15)$$

Методика расчета приведена в Приложении Б. Таким образом, уравнение для произведения коэффициента экстинкции на функцию источников (5.5) удовлетворяется в среднем по ячейке. Примером такого подхода является ступенчатый метод характеристик [217]. Разностные схемы нулевого порядка являются согласованными и, следовательно, консервативными.

5.3.2 Разностная схема первого порядка

В разностных схемах первого порядка \hat{S}_p меняется линейно по ячейке. Схема, описанная в [187], использует метод интерполяции, отличный от (5.6); предполагается кусочно-линейная схема интерполяции σ_{ext} и \hat{S}_p (интерполяция по трем точкам ближайшим точкам):

$$\hat{S}_p(x, z) = \begin{cases} \sum_{k=1;2;4} T_k^1(x, z) \hat{S}_p^k, & \Delta x / \Omega_x^p \leq \Delta z / \Omega_z^p \\ \sum_{k=1;3;4} T_k^1(x, z) \hat{S}_p^k, & \Delta x / \Omega_x^p > \Delta z / \Omega_z^p \end{cases}, \quad (5.16)$$

где T_k^1 – интерполяционные базисные функции первого порядка для треугольного элемента.

Разностная схема первого порядка использует значения яркости в угловых точках ячейки \hat{I}_p^k , $k = 1, \dots, 4$. В контексте краевой задачи (5.4) величины \hat{I}_p^1 , \hat{I}_p^2 и \hat{I}_p^3 являются исходными параметрами, а \hat{I}_p^4 – искомой величиной. Для расчета \hat{I}_p^4 через данный узел проводится характеристика. В точке пересечения характеристики с левой или нижней границами ячейки яркость определяется с помощью линейной интерполяции между окружающими угловыми точками в соответствии с (5.7). Обозначим это значение за $\hat{I}_p(0)$. Оно используется при интегрировании вдоль характеристики для нахождения яркости в верхнем правом углу $\hat{I}_p^4 = \hat{I}_p(s)$:

$$\hat{I}_p(s) = \hat{I}_p(0) e^{-\int_0^s \sigma_{\text{ext}}(s') ds'} + \int_0^s \hat{S}_p(s') e^{-\int_{s'}^s \sigma_{\text{ext}}(s'') ds''} ds'. \quad (5.17)$$

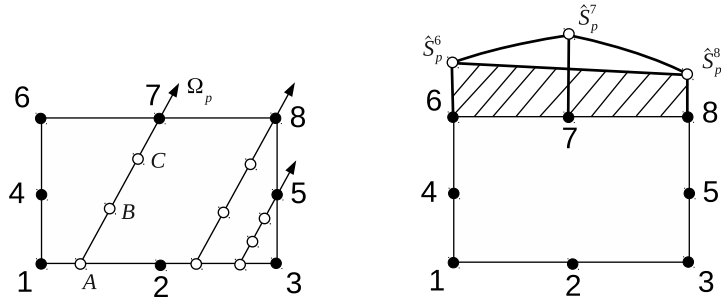


Рисунок 5.3 — Слева: расчет яркости в точке выхода характеристики из ячейки для квадратичного элемента. Для расчета \hat{S}_p с помощью интерполяционного полинома Лагранжа третьей степени используются точки A , B , C и 7 . Справа показана ошибка линейной интерполяции вдоль границы N для квадратичного элемента.

Интерполяционная схема (5.16) подразумевает, что σ_{ext} и \hat{S}_p зависят от s линейно вдоль характеристики. При этом интерполяционная схема (5.6) дает квадратичную зависимость.

Аналитическое выражение для \hat{I}_p^4 получено в [187] и приведено в Приложении В.

5.3.3 Разностная схема высокого порядка

В разностных схемах высокого порядка \hat{S}_p является полиномом степени $r > 1$. Также как и в разностной схеме первого порядка, значения яркости в узлах могут быть вычислены с помощью метода интегрирования по характеристике (5.17)-(7.23). Вычисления организуются следующим образом (см. рисунок 5.3):

1. Через узел, в котором требуется рассчитать яркость, проводится характеристика до пересечения с границей ячейки.
2. Изменение произведения коэффициента экстинкции на функцию источников вдоль характеристики выражается через интерполяционный полином Лагранжа степени $r + 1$ (при этом характеристика делится $r + 2$ эквидистантными точками, две из которых расположены на границах ячейки), и в каждой точке произведение коэффициента экстинкции на функцию источников вычисляется через выражение (5.6)).
3. Яркость в точке выхода характеристики рассчитывается с помощью метода интегрирования по характеристике (5.17)-(7.23).

Ячейки высокого порядка (например, квадратичные или кубические) следует использовать, когда произведение коэффициента экстинкции на функцию источников изменяется нелинейно по ячейке. Для элемента порядка r можно рассчитать ошибку линейной интерполяции как разницу между средними значениями между произведением коэффициента экстинк-

ции на функцию источников при его линейной зависимости и полиномиальной зависимости степени r вдоль границы ячейки (см. рисунок 5.3). Для всей ячейки ошибка оценивается как сумма квадратов ошибок на всех четырех границах.

С целью ускорения вычислений имеет смысл использовать элементы высокого порядка для зон расчетной области с облаком и элементы первого порядка для зон без облака.

5.3.4 Ошибки интерполяции и баланса (сохранения потока)

Для расчета ошибок интерполяции и баланса необходимо знать значения яркости на границах N и E ячейки. Для определения искомых ошибок вычисления организованы следующим образом:

1. Ячейка делится на N_{sc} одинаковых субъячеек, в каждой субъячейке s вычисляются значения \hat{S}_{pc}^k на субсетке с помощью интерполяционной схемы высокого порядка (5.6).
2. Значения яркости на границах W и S ячейки в точках субсетки рассчитываются на основе (5.7).
3. Значения яркости в узлах субсетки рассчитываются последовательно, начиная с нижней левой субъячейки и заканчивая верхней правой субъячейкой, как показано на рисунке 5.4.
4. В каждой субъячейке s значения яркости \hat{I}_{pc}^4 в угловых точках определяются методом характеристик при линейной зависимости произведения коэффициента экстинкции на функцию источников.
5. Средние по граням E и N значения яркости \hat{I}_p^E и \hat{I}_p^N вычисляются по значениям яркости в точках субсетки на границах E и N с помощью формулы трапеций.

Такой метод также называется методом деления ячейки.

Ошибки интерполяции и баланса зависят от пространственного разрешения сетки и от числа субъячеек. Для разностной схемы первого порядка Шаг 4 гарантирует, что значения яркости в узлах субсетки рассчитываются с достаточной точностью для любого N_{sc} . Но средние значения яркости \hat{I}_p^E и \hat{I}_p^N являются интегральными величинами и точность их расчета повышается с ростом числа субъячеек. При малом пространственном разрешении (при грубой сетке) решение уравнения (5.4) может быть сильно нелинейным по ячейке; в этом случае при увеличении N_{sc} значения усредненных по границе значений яркости будут приближаться к точным значениям и отклонение от линейной аппроксимации будет больше. С другой

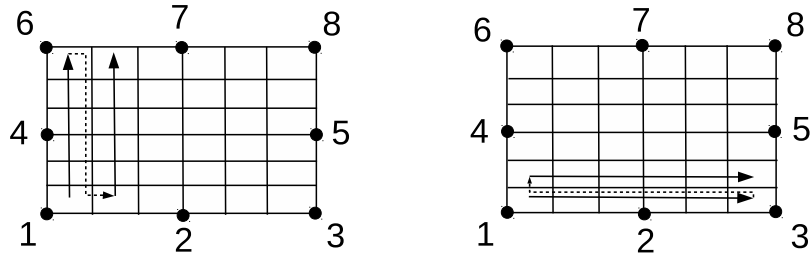


Рисунок 5.4 — Схема обхода субъячеек ячеек по столбцам (слева) и по строкам (справа) для вычисления значений яркости в узлах квадратичного элемента.

стороны, увеличивая пространственное разрешение, зависимость яркости от координаты становится «более линейной» по ячейке и при фиксированном количестве субъячеек N_{sc} ошибка будет уменьшаться.

Яркость в верхнем правом углу \hat{I}_{pc}^4 может быть рассчитана для каждой субъячейки с помощью схемы нулевого порядка, которая быстрее линейной схемы (см. Шаг 4). Например, могут быть использованы ступенчатый метод характеристик (the step characteristic scheme), схема Wendroff, схема Woods-Carlson или схема конечных разностей. Однако при таком подходе интерполянт $\hat{S}_p(x, z)$ степени r аппроксимируется кусочно-постоянными функциями в субъячейке. Тогда точность вычисления $\hat{I}_p(x, z)$ будет сильно зависеть от N_{sc} .

Хотя разностные схемы $r \geq 1$ являются несогласованными и неконсервативными, их можно сделать консервативными с помощью метода деления ячейки. Если в схеме первого порядка мы вычисляем яркость \hat{I}_p^4 как решение уравнения $\delta_{cp} = 0$, т.е.

$$\hat{I}_p^4 = w\hat{I}_{xp} + (1 - w)\hat{I}_{zp}, \quad (5.18)$$

где

$$\hat{I}_{xp} = 2\hat{I}_p^E - \hat{I}_p^2, \quad \hat{I}_{zp} = 2\hat{I}_p^N - \hat{I}_p^3, \quad w = \frac{\Omega_x^p/\Delta x}{\Omega_x^p/\Delta x + \Omega_z^p/\Delta z},$$

то схема становится консервативной, но остается несогласованной. Аналогично, схемы высокого порядка с $r > 1$ можно сделать согласованными, если значения яркости в узлах находить как решение системы уравнений $\delta_{ip}^E = 0$ и $\delta_{ip}^N = 0$. Заметим, что уравнение $\delta_{cp} = 0$ является линейной комбинацией этих двух уравнений. Поэтому мы имеем два независимых уравнения. Конечная система уравнений переопределена, но может быть решена в смысле наименьших квадратов.

Метод деления ячейки позволяет определить значения яркости внутри ячейки и, таким образом, и в интересующем нас узле. Стоит заметить, что значения яркости, рассчитан-

ные методом деления ячейки и методом интегрирования вдоль характеристики (5.17)-(7.23), строго говоря, не равны, так как применяются разные схемы интерполяции коэффициента экстинкции. С практической точки зрения метод деления ячейки лучше использовать, когда требуется рассчитать значения яркости и ошибки интерполяции и баланса. Если же требуется рассчитать только значения яркости, лучше использовать интегральный метод (5.17)-(7.23).

5.4 Численный анализ интерполяционных схем

В коде SHDOM реализованы разностные схемы первого и высоких порядков. В этой части мы проанализируем точность этих схем. Ошибки решения, интерполяции и баланса рассчитаны для верхней границы расчетной области (со стороны источника излучения). При этом вклад однократного рассеяния рассчитывается точно.

5.4.1 Разностная схема первого порядка

Рассмотрим неконсервативные схемы первого порядка с линейной и квадратичной зависимостью произведения коэффициента экстинкции на функцию источников, а также консервативную схему первого порядка (5.18). Яркость \hat{I}_p^4 рассчитывается согласно (7.24), (7.25) и (5.18). Ошибки интерполяции и баланса определяются с помощью метода деления ячейки. Количество интервалов субрешетки вдоль осей x и z выбрано равным

$$N_{\text{sc}}^x = N_{\text{sc}}^z = \max \left(\left\lceil \frac{\tau_x}{\tau_0} \right\rceil, \left\lceil \frac{\tau_z}{\tau_0} \right\rceil \right) + N_{\text{sc}}^0, \quad (5.19)$$

где τ_x и τ_z оптические толщи вдоль осей x и z , соответственно. Параметры τ_0 и N_{sc}^0 определяют количество интервалов субрешетки в областях с облаком и без облака, соответственно. В представленных ниже расчетах $\tau_0 = 0.01$ и $N_{\text{sc}}^0 = 2$.

В первой тестовой модели рассмотрена плоско-параллельная модель атмосферы. Расчетная область 2×1 км ($x - z$). Коэффициент экстинкции зависит от z как

$$\sigma_{\text{ext}}(z) = \begin{cases} 5.0, & 0.6 \leq z \leq 0.8 \\ 2.0, & 0.2 \leq z \leq 0.4 \\ 0.1, & \text{для остальных } z \end{cases} \quad \text{км}^{-1},$$

на базовой сетке с $(N_x = 11) \times (N_z = 11)$ точками. Число дискретных ординат $(N_\mu = 16) \times (N_\varphi = 32)$, альбедо однократного рассеяния 0.9. Используется индикатриса Henyey–Greenstein

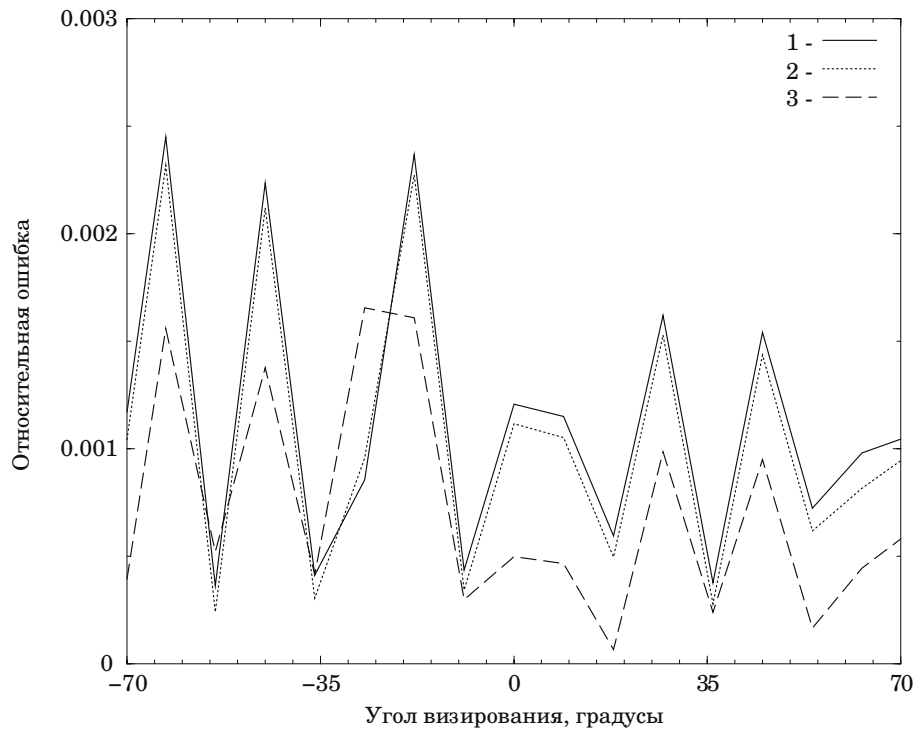


Рисунок 5.5 — Средняя относительная ошибка яркости отраженного излучения на верхней границе атмосферы как функция угла визирования для тестовой задачи № 1: 1 – неконсервативная схема первого порядка с линейной зависимостью произведения коэффициента экстинкции на функцию источников, 2 – то же самое, но с и квадратичной зависимостью, 3 – консервативная схема первого порядка.

с параметром асимметрии 0.85. Также применяется delta-M метод и адаптивная сетка. Здесь и далее используются периодические граничные условия. Угол падения 30° . Альбеда поверхности равно 0.2 при ламбертовском законе отражения. За эталонное решение принято решение одномерного алгоритма, который также реализован в SHDOM для инициализации итерационного расчета (а также для расчета в приближении независимых атмосферных столбов).

Относительная ошибка яркости на верхней границе расчетной области, усредненная по оси x , как функция угла визирования показана на рисунке 5.5. Величина ошибки не превышает 0.25%, причем у консервативной схемы она минимальная. Ошибки интерполяции и баланса составляют около 0.05% и 0.5%, соответственно.

Во второй тестовой задаче мы рассмотрим расчетную область 3.15×2 км, в которой присутствует облако Cumulus polluted (модель которого описана в части 89) между уровнями 1.4 и 1.6 км. Облако однородно по вертикальному направлению. Вдоль горизонтального направления коэффициент экстинкции изменяется согласно каскадной модели [323] шестого порядка с дисперсией 0.3 и коэффициентом уменьшения дисперсии 0.8 (см. рисунок 5.6). Среднее значение коэффициента экстинкции по оси x равно 2.0 км^{-1} . Помимо облака в систе-

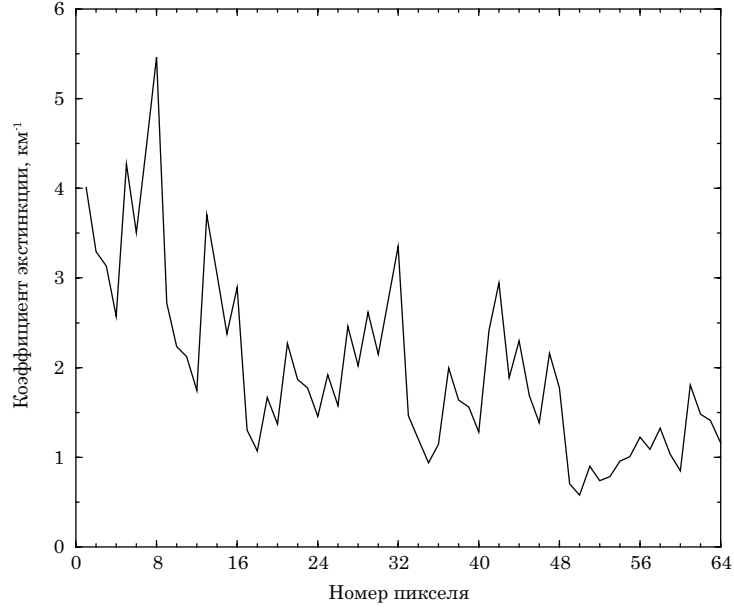


Рисунок 5.6 — Зависимость коэффициента экстинкции в облаке от координаты x для тестовой задачи № 2.

ме присутствует релеевское рассеяние. «Эталонное» решение вычисляется с помощью (7.25) при следующих параметрах углового и пространственного разрешения:

$$(N_\mu = 32) \times (N_\varphi = 64), \quad \Delta x \approx 6.15 \cdot 10^{-3} \text{ км } (N_x=512 \text{ точек}),$$

$$\Delta z_{\text{clear}} = 1.25 \cdot 10^{-2} \text{ км}, \quad \Delta z_{\text{cloud}} = 6.25 \cdot 10^{-3} \text{ км}, \quad (5.20)$$

где Δx — шаг по оси x , Δz_{clear} и Δz_{cloud} — шаги по оси z в области без облака и с облаком, соответственно. Для второй тестовой задачи адаптивная сетка не используется. Расчеты выполнены трех случаев:

$$(a) (N_\mu = 16) \times (N_\varphi = 32), \quad \Delta x \approx 5 \cdot 10^{-2} \text{ км } (N_x=64 \text{ точки}),$$

$$\Delta z_{\text{clear}} = 1 \cdot 10^{-1} \text{ км}, \quad \Delta z_{\text{cloud}} = 5 \cdot 10^{-2} \text{ км};$$

$$(b) (N_\mu = 16) \times (N_\varphi = 32), \quad \Delta x \approx 2.5 \cdot 10^{-2} \text{ км } (N_x=128 \text{ точек}),$$

$$\Delta z_{\text{clear}} = 5 \cdot 10^{-2} \text{ км}, \quad \Delta z_{\text{cloud}} = 2.5 \cdot 10^{-2} \text{ км}; \quad (5.21)$$

$$(c) (N_\mu = 16) \times (N_\varphi = 32), \quad \Delta x \approx 1.25 \cdot 10^{-2} \text{ км } (N_x=256 \text{ точек}),$$

$$\Delta z_{\text{clear}} = 2.5 \cdot 10^{-2} \text{ км}, \quad \Delta z_{\text{cloud}} = 1.25 \cdot 10^{-2}.$$

Относительные ошибки функциях яркости, усредненные по оси x , на верхней границе атмосферы показаны на рисунке 5.7. В таблице 241 приведены относительные ошибки в ре-

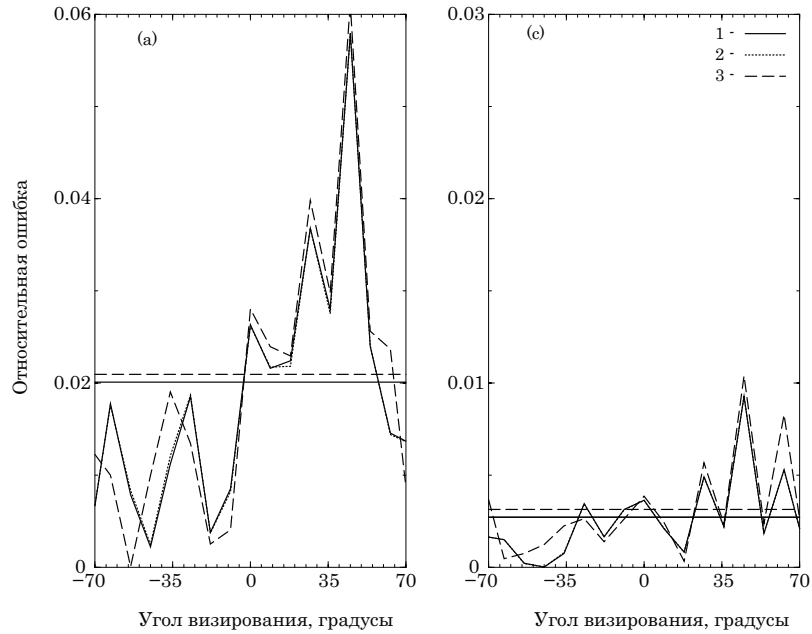


Рисунок 5.7 — Усредненные относительные ошибки яркости отраженного излучения на верхней границе атмосферы как функция угла зенитного визирования для тестовой задачи № 2. Слева показаны результаты для случая (а), справа – для случая (с): 1 – неконсервативная схема первого порядка с линейной зависимостью произведения коэффициента экстинкции на функцию источников, 2 – тоже, но с и квадратичной зависимостью, 3 – консервативная схема первого порядка.

Таблица 5.1 — Ошибки решения, интерполяции и баланса для тестовой задачи № 2

Набор параметров	Ошибка	Метод		
		линейный	квадратичный	консервативный
(а)	решения	2.012e-2	2.011e-2	2.096e-2
	интерполяции по границе	0.398e-2	0.390e-2	0.408e-2
	баланса	0.188e0	0.169e0	—
(б)	решения	8.463e-3	8.447e-3	9.128e-3
	интерполяции по границе	0.151e-2	0.150e-2	0.168e-2
	баланса	0.163e0	0.146e0	—
(с)	решения	2.730e-3	2.726e-3	3.143e-3
	интерполяции по границе	0.860e-3	0.858e-3	0.896e-3
	баланса	0.138e0	0.124e0	—

шении, усредненные по оси x и углу визирования, а также средние ошибки интерполяции и баланса. При этом стоит заметить следующее:

1. Из приведенных ошибок решения видно, что метод характеристик с квадратичной зависимостью произведения коэффициента экстинкции на функцию источников несколько точнее метода характеристик с линейной зависимостью, который в свою очередь точнее консервативной схемы. Однако, разница в точности не велика.
2. Ошибки интерполяции и баланса уменьшаются с увеличением пространственного разрешения. Поведение ошибки в решении связано с поведением ошибки интерполяции. Таким образом, согласованность разностной схемы, а не её консервативность является показателем точности решения.

Для случая (а) зависимость ошибки интерполяции от N_{sc}^0 показана на рисунке 5.8. Для линейных и квадратичных схем ошибки изменяются очень медленно с увеличением N_{sc}^0 ; они увеличиваются с 0.34% до 0.4% при увеличении N_{sc}^0 с 2 до 20. Для консервативной схемы рост более быстрый: с 0.31% до 0.41%. Тем не менее, ошибка выходит на плато при достаточно большом значении N_{sc}^0 , приблизительно при $N_{sc}^0 = 8$. Таким образом, для $N_{sc}^0 \geq 8$, нелинейные яркости на границе ячейки рассчитываются с достаточной точностью и их отклонение их средней величины от усредненной линейной величины увеличивается.

5.4.2 Разностные схемы высокого порядка

Для анализа разностных схем высокого порядка рассмотрим тестовую задачу, сходную с предыдущей. Но облако расположено между уровнями 1.2 км и 1.6 км. Зависимость коэффициента экстинкции описывается с помощью статистической модели для разорванной облачности [331] с параметром облачности 0.4 и показана на рисунке 5.9. Среднее значение коэффициента экстинкции по оси x равно 4.0 км^{-1} . Если не указано иное, яркости рассчитываются с помощью разностной схемы порядка r , а ошибки интерполяции и баланса рассчитываются с помощью метода деления ячейки с $2r$ под-интервалами субъячейки на каждой грани ячейки.

На рисунке 5.10 показаны относительные ошибки функции яркости на верхней границе атмосферы, усредненные по оси x и зенитному углу визирования. Расчеты выполнены на базовой сетке с линейными, квадратичными, кубическими, а также четвертого порядка ячейками. Усреднение по углу выполнено на интервале $-70^\circ \div 70^\circ$ с угловым распределением

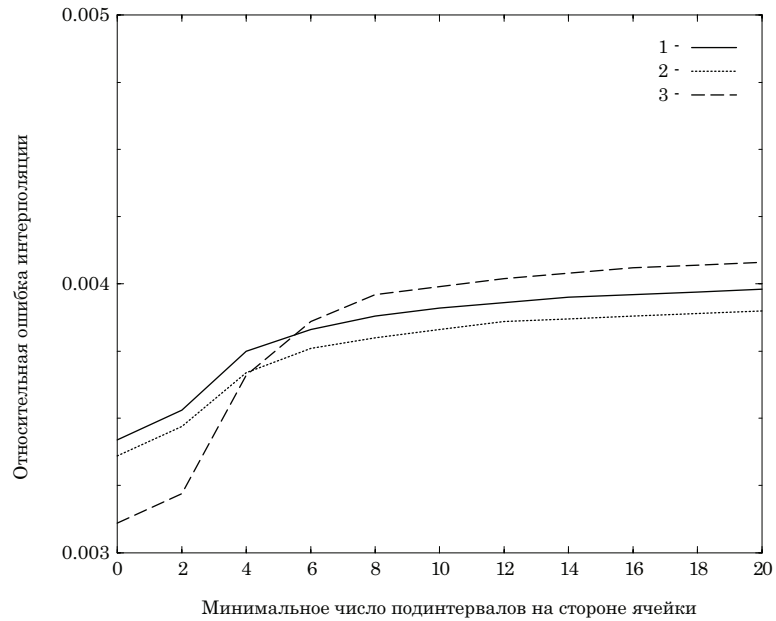


Рисунок 5.8 — Зависимость ошибки интерполяции от минимального числа интервалов субрешетки на грани ячейки N_{sc}^0 для тестовой задачи № 2: 1 — неконсервативная схема первого порядка с линейной зависимостью произведения коэффициента экстинкции на функцию источников, 2 — то же, но с и квадратичной зависимостью, 3 — консервативная схема первого порядка.

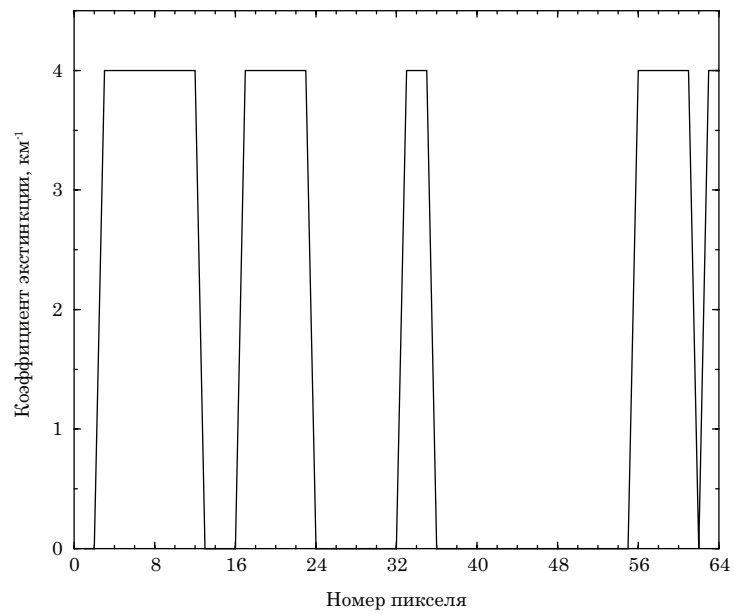


Рисунок 5.9 — Зависимость коэффициента экстинкции облака вдоль оси x для тестовой задачи № 3.

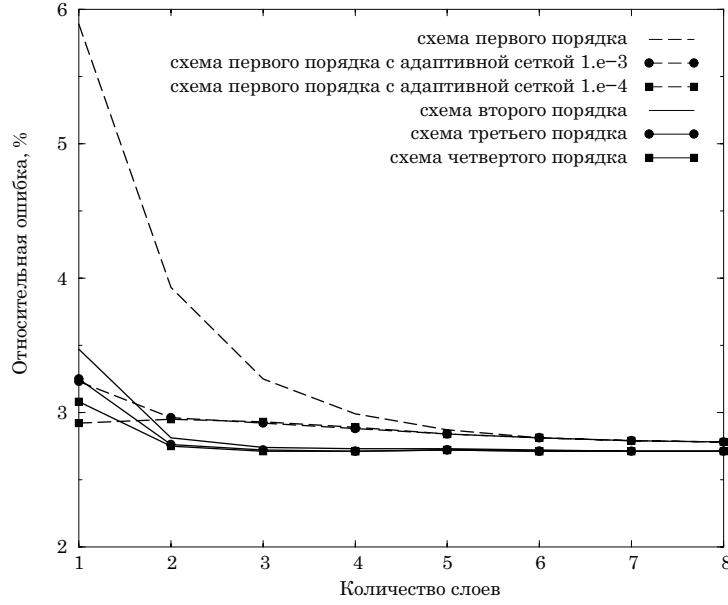


Рисунок 5.10 — Зависимость средней относительной ошибки яркости на верхней границе атмосферы как функция числа подслоев облака N_{cloud} для тестовой задачи № 3.

2°. «Эталонное» решение рассчитано при следующих параметрах

$$(N_\mu = 48) \times (N_\varphi = 96), \quad \Delta x \approx 6.15 \cdot 10^{-3} \text{ км } (N_x=512 \text{ точек}),$$

$$\Delta z_{\text{clear}} = 6.25 \cdot 10^{-3} \text{ км}, \quad \Delta z_{\text{cloud}} = 6.25 \cdot 10^{-3} \text{ км}. \quad (5.22)$$

Вычисления выполнены на базовой сетке с переменным Δz_{cloud} :

$$(N_\mu = 32) \times (N_\varphi = 64), \quad \Delta x \approx 5 \cdot 10^{-2} \text{ км } (N_x=64 \text{ точек}),$$

$$\Delta z_{\text{clear}} = 1 \cdot 10^{-1} \text{ км}, \quad \Delta z_{\text{cloud}} = t/N_{\text{cloud}}, \quad (5.23)$$

где $t = 0.4$ км – геометрическая толщина слоя облака, N_{cloud} – число слоев, на которые разбивается облако. Для каждой базовой сетки (5.23) также показаны результаты расчета с линейными элементами с адаптивной сеткой. Адаптивная сетка применяется в слое облака при $\varepsilon_{\text{adapt}} = 10^{-3}$ и $\varepsilon_{\text{adapt}} = 10^{-4}$. Случай (5.23) выбран с тем, чтобы проанализировать точность расчета на ячейках высокого порядка при низком пространственном разрешении. При $1 \leq N_{\text{cloud}} < 4$ прямоугольные ячейки сильно вытянуты в направлении оси z и расчет на базовой сетке с линейными ячейками содержит большую ошибку ($\approx 6\%$), которая уменьшается до 2.7% с ростом пространственного разрешения. Величина ошибки при использовании адаптивной сетки слабо зависит от N_{cloud} и равна $\approx 2.8\%$ при обоих значениях $\varepsilon_{\text{adapt}}$. Величина

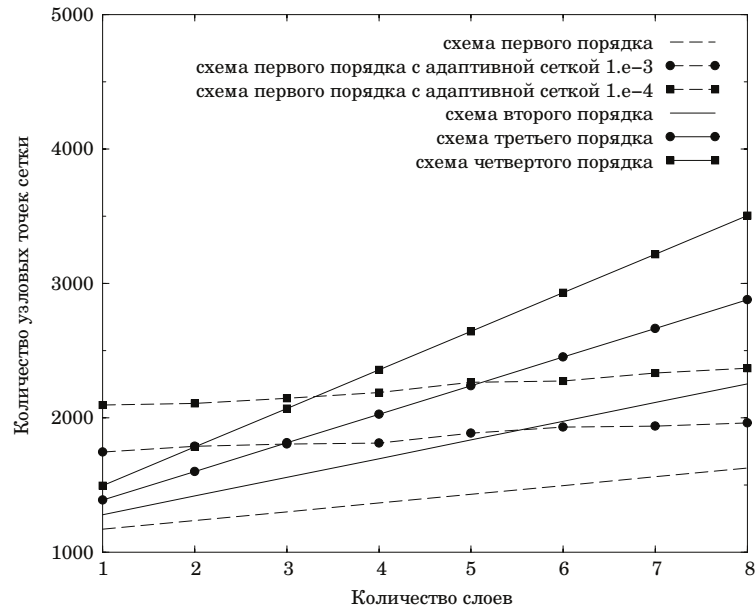


Рисунок 5.11 — Количество точек сетки как функция числа дискретных интервалов в слое облака N_{cloud} для тестовой задачи № 3.

ошибки в случае с ячейками высокого порядка минимальная: уже при $N_{\text{cloud}} \geq 2$ она меньше 2.7%. При $N_{\text{cloud}} \geq 4$ точность всех схем высокого порядка практически одинакова.

На рисунке 5.11 показана зависимость количества точек сетки от числа дискретных интервалов в слое облака. Для адаптивной сетки количество точек практически постоянно. То есть при разных значениях N_{cloud} получается практически одинаковая конечная расчетная сетка. Пространственные разрешения базовой сетки с квадратичными ячейками и адаптивной сетки с линейными элементами сопоставимы.

Времена счета для тестовой задачи № 3 показаны на рисунке 5.12. Для схем высокого порядка значения яркости рассчитаны с помощью метода деления ячейки и с помощью метода интегрирования по характеристике (5.17)-(7.23). На графике видно, что адаптивная сетка в два-три раза быстрее базовой сетки с ячейками высокого порядка; при $N_{\text{cloud}} = 4$ время счета с адаптивной сеткой в среднем 4 секунды, с базовой сеткой с квадратными ячейками 5.5 секунд для метода интегрирования по характеристике и 7.8 секунд для метода деления ячейки.

Рисунки (5.10)-(5.12) показывают, что при $1 < N_{\text{cloud}} \leq 4$, базовая сетка с квадратичными ячейками с методом интегрирования по характеристике немного точнее адаптивной сетки с $\varepsilon_{\text{adapt}} = 10^{-3}$, при этом число точек меньше в 1.14 раза, а время счета больше в 1.4 раза.

На рисунке 5.13 показана зависимость ошибки линейной интерполяции в кубическом элементе от N_{cloud} . При $1 \leq N_{\text{cloud}} \leq 4$, ошибка быстро уменьшается от 1% до 0.36% и далее медленно убывает с ростом N_{cloud} до 0.3%. Следовательно, при $N_{\text{cloud}} > 4$ произведение коэф-

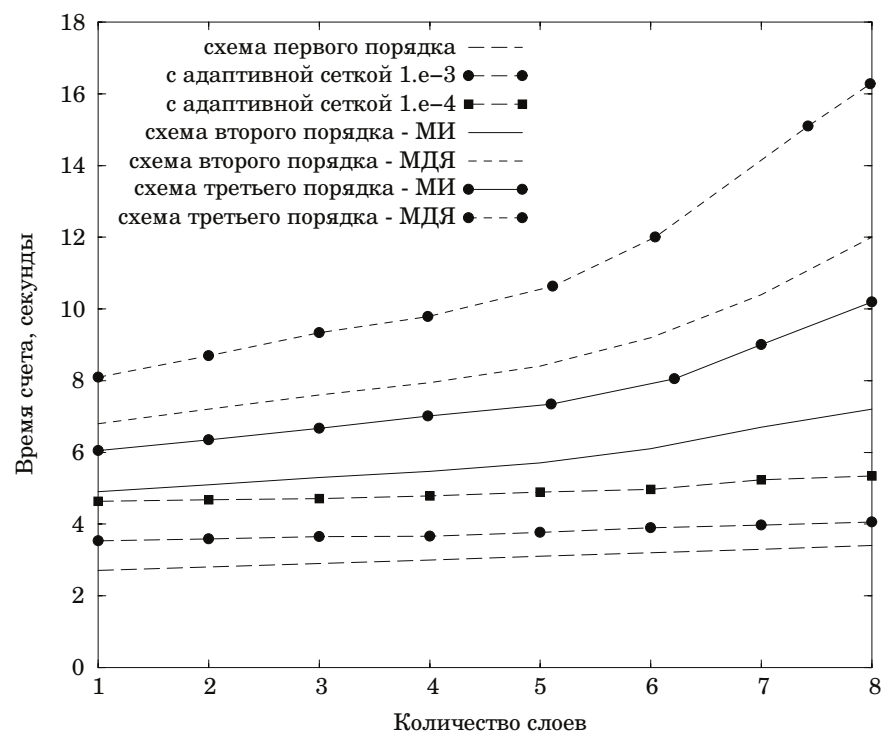


Рисунок 5.12 — Времена счета для тестовой задачи № 3. Для квадратичных и кубических ячеек яркости рассчитаны с помощью метода деления ячейки (МДЯ) и с помощью метода интегрирования по характеристике (5.17)-(7.23) (МИ).

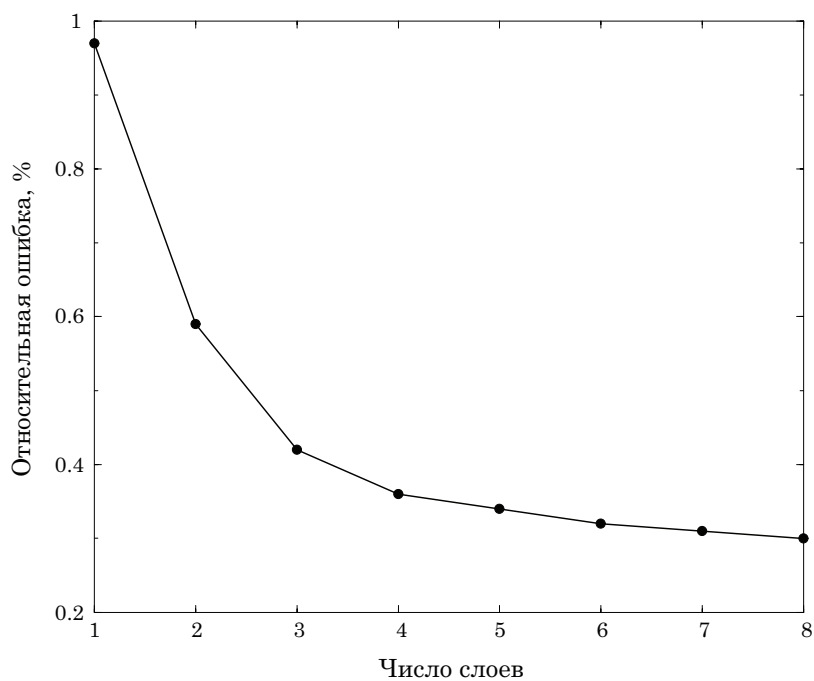


Рисунок 5.13 — Величина ошибки линейной интерполяции в кубическом элементе как функция N_{cloud} .

Таблица 5.2 — Ошибки решения, интерполяции и баланса для тестовой задачи № 3.

Набор параметров	Ошибка	Элемент	
		квадрат.	кубический
(a)	решения	2.726e-2	2.713e-2
	интерполяции по границе	0.101e-2	0.782e-3
	баланса	0.494e-1	0.330e-1
(b)	решения	1.473e-2	1.458e-2
	интерполяции по границе	0.693e-3	0.589e-3
	баланса	0.249e-1	0.161e-1
(c)	решения	5.211e-3	5.126e-3
	интерполяции по границе	0.576e-3	0.532e-3
	баланса	0.139e-1	0.974e-2

коэффициента экстинкции на функцию источников зависит от координат практически линейно, и схемы высокого порядка не приводят к существенному росту точности решения.

В таблице 5.2 приведены относительные ошибки решения, интерполяции и баланса. Расчеты выполнены при $(N_\mu = 32) \times (N_\varphi = 64)$ и трех сетках, приведенных в (5.21). Как ожидалось, точность схем с кубическими ячейками несколько выше аналогов, при этом поведение ошибки интерполяции сходно с поведением ошибки решения.

Практические выводы из представленного анализа заключаются в том, что

1. ошибка в схемах первого порядка с адаптивной сеткой сопоставима по точности и количеству используемой памяти с ошибкой схем высокого порядка с регулярной сеткой, но превосходят их по скорости вычислений;
2. схема первого порядка, в которой предполагается квадратичная зависимость произведения коэффициента экстинкции на функцию источников по ячейке, несколько точнее метода, реализованного в коде SHDOM, в котором указанное произведение меняется линейно по характеристике.

5.5 Решение прямой задачи: VSHDOM

Как уже отмечалось, эффективность SHDOM обусловлена совместным представлением функции яркости и функции источников через дискретные ординаты и сферические функции. Для того, чтобы применить формализм SHDOM к векторному случаю, необходимо иметь

ортогональную и полную систему обобщенных сферических гармоник на единичной сфере. По ним раскладываются вектор Стокса и функция источников. Если система ортогональна, то возможно получить соотношение между коэффициентами разложения этих величин с одинаковыми индексами и, следовательно, методология SHDOM будет сохранена.

Сферические гармоники используются для представления вектора Стокса в циркулярном базисе [344, 345]. Такое построение обусловлено методом, который используется для решения одномерного векторного уравнения переноса. «В скалярном варианте разложение индикатрисы рассеяния по полиномам Лежандра приводит на основе теоремы сложения для сферических функций к разделению зависимостей от азимутального и зенитного углов [57], что сводит двукратный интеграл к однократному. В случае переноса поляризованного излучения плоскости референции падающего и рассеянного лучей и плоскость рассеяния не совпадают. Математически это приводит к появлению в векторном уравнении ротатора, который искажает угловую симметрию подынтегрального уравнения и не позволяет применить теорему сложения для сферических функций [346]. Представление в циркулярном базисе изменяет форму ротатора, что позволяет использовать для представления матрицы рассеяния обобщенные сферические функции, для которых справедлива своя теорема сложения, соответствующая симметрии ротатора в циркулярном базисе. Однако в результате применения теоремы сложения все коэффициенты в уравнении становятся комплексными, что затрудняет использование эффективных численных алгоритмов» (Будак В.П.) Поэтому после применения теоремы сложения следует вернуться к представлению в исходном базисе [347, 348]. Желая воспользоваться идеологией SHDOM в векторном случае, далее мы рассмотрим построение обобщенных сферических функций в линейном базисе (в энергетическом представлении вектора Стокса).

5.5.1 Обобщенные сферические гармоники

Векторное уравнение переноса записывается для вектора Стокса $\mathbf{I} = [I, Q, U, V]^T$, где I описывает полную интенсивность, Q и U описывают линейную поляризацию, V характеризует круговую поляризацию:

$$\frac{d\mathbf{I}}{ds}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = -\sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) [\mathbf{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - \mathbf{J}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})],$$

где функция источников записывается в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, \mu, \varphi) &= \frac{\omega(\mathbf{r})}{4\pi} \mathbf{Z}(\mathbf{r}, \mu, -\mu_0, \varphi - \varphi_0) \mathbf{F}_0 e^{-\tau_{\text{ext}}^{\text{sun}}(\mathbf{r})} \\ &+ \frac{\omega(\mathbf{r})}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{Z}(\mathbf{r}, \mu, \mu', \varphi - \varphi') \mathbf{I}(\mathbf{r}, \mu', \varphi') d\mu d\varphi', \end{aligned} \quad (5.24)$$

σ_{ext} – коэффициент экстинкции, ω – альбеда однократного рассеяния, \mathbf{Z} – фазовая матрица, $\boldsymbol{\Omega}_0 = (-\mu_0, \varphi_0)$ – направление падающего излучения, $\mathbf{F}_0 = [F_0, 0, 0, 0]^T$ описывает неполяризованное солнечное излучение, F_0 – падающий солнечный поток, $\tau_{\text{ext}}^{\text{sun}}(\mathbf{r})$ – оптическая толщина для солнечного излучения в точке \mathbf{r} .

Построение обобщенных сферических функций определяется азимутальным разложением фазовой матрицы. Эта техника развивалась в работах Kuscer и Ribaric [344], Siewert [349, 350] и Novenier [351], обзоры которой можно найти в [352, 353], а также в [75, 249]. Разложение в ряд Фурье фазовой матрицы имеет следующий вид:

$$\mathbf{Z}(\mu, \mu', \varphi - \varphi') = \sum_{m=-M}^M \mathbf{Z}_m(\mu, \mu') e^{jm(\varphi - \varphi')}, \quad (5.25)$$

где комплексные коэффициенты разложения представлены как ¹

$$\mathbf{Z}_m(\mu, \mu') = \sum_{n=|m|}^N \mathbf{T} \mathbf{P}_{nm}(\mu) \mathbf{G}_n \mathbf{P}_{nm}(\mu') \mathbf{T}^*. \quad (5.26)$$

В (5.26) \mathbf{P}_{nm} является действительной симметричной матрицей:

$$\mathbf{P}_{nm}(\mu) = \begin{bmatrix} d_{m0}^n(\mu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_{m+}^n(\mu) & d_{m-}^n(\mu) & 0 \\ 0 & d_{m-}^n(\mu) & d_{m+}^n(\mu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{m0}^n(\mu) \end{bmatrix}, \quad (5.27)$$

где $d_{mm'}^n$ – нормированные d -функции Вигнера², и

$$d_{m\pm}^n(\mu) = -\frac{1}{2} [d_{m2}^n(\mu) \pm d_{m-2}^n(\mu)]. \quad (5.28)$$

¹Для упрощения обозначений, зависимость от \mathbf{r} была опущена.

²<http://theoretical-physics.net/dev/src/math/wigner.html>

Диагональная матрица \mathbf{T} имеет вид

$$\mathbf{T} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{I}_4 + \mathbf{jD}), \quad (5.29)$$

где \mathbf{I}_4 – четырехмерная единичная матрица, $\mathbf{D} = \text{diag}[1, 1, -1, -1]$. Так как $\mathbf{T}^H = \mathbf{T}^* = (1/\sqrt{2})(\mathbf{I}_4 - \mathbf{jD})$, \mathbf{T} – унитарная матрица, то есть $\mathbf{T}\mathbf{T}^* = \mathbf{I}_4$ (здесь и далее \mathbf{X}^T , \mathbf{X}^* и \mathbf{X}^H обозначают транспонированную матрицу \mathbf{X} , сопряженную и эрмитово-сопряженную к \mathbf{X} матрицы, соответственно). Матрица \mathbf{G}_n является вещественной и имеет блочно-диагональный вид:

$$\mathbf{G}_n = \begin{bmatrix} \chi_{1n} & \varsigma_{1n} & 0 & 0 \\ \varsigma_{1n} & \chi_{2n} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{3n} & \varsigma_{2n} \\ 0 & 0 & -\varsigma_{2n} & \chi_{4n} \end{bmatrix}.$$

Её элементы являются коэффициентами разложения матрицы рассеяния

$$\mathbf{F}(\Theta) = \begin{bmatrix} a_1(\Theta) & b_1(\Theta) & 0 & 0 \\ b_1(\Theta) & a_2(\Theta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_3(\Theta) & b_2(\Theta) \\ 0 & 0 & -b_2(\Theta) & a_4(\Theta) \end{bmatrix}$$

по d -функциям Вигнера:

$$a_1(\Theta) = \sum_{n=0}^N \sqrt{\frac{2n+1}{2}} \chi_{1n} d_{00}^n(\cos \Theta).$$

Разложение в ряд Фурье по тригонометрическим функциям приведено в [350]:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}(\mu, \mu', \varphi - \varphi') = & \mathbf{Z}_0^c(\mu, \mu') + 2 \sum_{m=1}^M [\mathbf{Z}_m^c(\mu, \mu') \cos m(\varphi - \varphi') \\ & + \mathbf{Z}_m^s(\mu, \mu') \sin m(\varphi - \varphi')], \end{aligned} \quad (5.30)$$

где

$$\begin{aligned}\mathbf{Z}_m^c(\mu, \mu') &= \frac{1}{2} [\mathbf{W}_m(\mu, \mu') + \mathbf{D}\mathbf{W}_m(\mu, \mu')\mathbf{D}], \\ \mathbf{Z}_m^s(\mu, \mu') &= \frac{1}{2} [\mathbf{W}_m(\mu, \mu')\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{W}_m(\mu, \mu')],\end{aligned}\quad (5.31)$$

$$\mathbf{W}_m(\mu, \mu') = \sum_{n=m}^N \mathbf{P}_{nm}(\mu) \mathbf{G}_n \mathbf{P}_{nm}(\mu'). \quad (5.32)$$

5.5.2 Комплексные обобщенные сферические функции

Чтобы обойти переход между представлениями в циркулярном и линейном базисах, в заключении статьи [348] предлагается использовать функции \mathbf{P}_{nm} (5.27) в качестве базисных. Действительно, из ортогональности d -функций Вигнера

$$\int_{-1}^1 d_{mm'}^n(\mu) d_{mm'}^{n'}(\mu) d\mu = \delta_{nn'} \quad (5.33)$$

следует ортогональность \mathbf{P}_{nm} на интервале $[-1, 1]$:

$$\int_{-1}^1 \mathbf{P}_{nm}(\mu) \mathbf{P}_{n'm}(\mu) d\mu = \mathcal{I}_n \delta_{nn'}, \quad (5.34)$$

где при $n = 0$ или $n = 1$ — $\mathcal{I}_n = \text{diag}[1, 0, 0, 1]$, а при $n > 1$ — $\mathcal{I}_n = \mathbf{I}_4$ (доказательство ортогональности приведено в Приложении Г). С учетом (5.26) определим комплексные обобщенные сферические функции:

$$\mathbf{Y}_{nm}(\mu, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathbf{T} \mathbf{P}_{nm}(\mu) e^{jm\varphi}. \quad (5.35)$$

Используя (5.34) и $\mathbf{Y}_{nm}^H(\mu, \varphi) = (1/\sqrt{2\pi}) \mathbf{P}_{nm}(\mu) \mathbf{T}^* e^{-jm\varphi}$, легко показать, что для \mathbf{Y}_{nm} выполняется условие ортогональности:

$$\int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{Y}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{Y}_{n'm'}^H(\mu, \varphi) d\mu d\varphi = \mathcal{I}_n \delta_{nn'} \delta_{mm'}. \quad (5.36)$$

Далее, с учетом (5.26) и (5.35) можно получить разложение фазовой функции по функциям \mathbf{Y}_{nm} :

$$\mathbf{Z}(\mu, \mu', \varphi - \varphi') = 2\pi \sum_{m=-M}^M \sum_{n=|m|}^N \mathbf{Y}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{G}_n \mathbf{Y}_{nm}^H(\mu', \varphi'). \quad (5.37)$$

Аналогично вектор Стокса и функция источников могут быть разложены по \mathbf{Y}_{nm} :

$$\mathbf{I}(\mu, \varphi) = \sum_{m=-M}^M \sum_{n=|m|}^N \mathbf{Y}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{I}_{nm}, \quad (5.38)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, \mu, \varphi) = \sum_{m=-M}^M \sum_{n=|m|}^N \mathbf{Y}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{J}_{nm}, \quad (5.39)$$

Используя соотношения (5.24), (5.36) и (5.37), находим, что

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{nm} = & \frac{\omega}{2} \mathbf{G}_n \mathbf{I}_{nm} + \frac{\omega}{2} \mathbf{G}_n \mathbf{Y}_{nm}^{\mathbf{H}}(-\mu_0, \varphi_0) \mathbf{F}_0 e^{-\tau_{\text{ext}}^{\text{sun}}} \\ & + (1 - \omega) \sqrt{4\pi} \mathbf{T}^* \mathbf{B} \delta_{n0} \delta_{m0}. \end{aligned} \quad (5.40)$$

При этом коэффициенты разложения вектора Стокса рассчитываются следующим образом:

$$\mathbf{I}_{nm} = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{Y}_{nm}^{\mathbf{H}}(\mu, \varphi) \mathbf{I}(\mu, \varphi) d\mu d\varphi. \quad (5.41)$$

При $n = 0$ и $n = 1$: $[\mathbf{I}_{nm}]_2 = [\mathbf{I}_{nm}]_3 = 0$ и $[\mathbf{J}_{nm}]_2 = [\mathbf{J}_{nm}]_3 = 0$. Соотношение (5.40) является главным результатом этой части. Оно является обобщением соотношения 1 из [187], полученного для скалярного случая, на векторный. Вектор Стокса и функция источников представляются в базисе ортогональных функций, что позволяет использовать вычислительную SHDOM при решении задач с поляризацией.

5.5.3 Действительные обобщенные сферические функции

Аналогично комплексным можно определить действительные обобщенные сферические функции:

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{nm}(\mu, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\mathbf{P}_{nm}(\mu) \cos m\varphi - \mathbf{D}\mathbf{P}_{nm}(\mu) \sin m\varphi], \quad m \geq 0, \\ \mathbf{V}_{nm}(\mu, \varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\mathbf{P}_{nm}(\mu) \sin m\varphi + \mathbf{D}\mathbf{P}_{nm}(\mu) \cos m\varphi], \quad m > 0. \end{aligned} \quad (5.42)$$

\mathbf{U}_{nm} и \mathbf{V}_{nm} с точностью до множителя совпадают с $\text{Re}\{\mathbf{Y}_{nm}\}$ и $\text{Im}\{\mathbf{Y}_{nm}\}$, соответственно. Из ортогональности \mathbf{P}_{nm} (5.34) следует ортогональность \mathbf{U}_{nm} и \mathbf{V}_{nm} :

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{U}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{U}_{n'm'}^T(\mu, \varphi) d\mu d\varphi &= \mathcal{I}_n \delta_{nn'} \delta_{mm'}, \quad m, m' \geq 0, \\ \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{V}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{V}_{n'm'}^T(\mu, \varphi) d\mu d\varphi &= \mathcal{I}_n \delta_{nn'} \delta_{mm'}, \quad m, m' > 0, \\ \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{U}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{V}_{n'm'}^T(\mu, \varphi) d\mu d\varphi &= 0, \quad m \geq 0, m' > 0. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Используя соотношения $\mathbf{P}_{n0} = \text{diag}[d_{00}^n, -d_{02}^n, -d_{02}^n, d_{00}^n]$, $\mathbf{P}_{n0} = \mathbf{D}\mathbf{P}_{n0}\mathbf{D}$, $\mathbf{G}_n = \mathbf{D}\mathbf{G}_n\mathbf{D}$, а также (5.30), (5.32) и (5.31), получим:

$$\mathbf{Z}_0^c(\mu, \mu') = \sum_{n=0}^N \mathbf{P}_{n0}(\mu) \mathbf{G}_n \mathbf{P}_{n0}(\mu') = 2\pi \sum_{n=0}^N \mathbf{U}_{n0}(\mu, \varphi) \mathbf{G}_n \mathbf{U}_{n0}^T(\mu', \varphi').$$

Затем, после преобразований \mathbf{Z} имеет вид:

$$\begin{aligned} &\mathbf{Z}(\mu, \mu', \varphi - \varphi') \\ &= 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{U}_{n0}(\mu, \varphi) \mathbf{G}_n \mathbf{U}_{n0}^T(\mu', \varphi') + 2\pi \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=|m|}^{\infty} [\mathbf{U}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{G}_n \mathbf{U}_{nm}^T(\mu', \varphi') \\ &\quad + \mathbf{V}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{G}_n \mathbf{V}_{nm}^T(\mu', \varphi')] . \end{aligned} \quad (5.44)$$

Принимая во внимание разложения

$$\mathbf{I}(\mu, \varphi) = \sum_{n=0}^N \mathbf{U}_{n0}(\mu, \varphi) \mathbf{I}_{n0}^u + \sum_{m=1}^M \sum_{n=m}^N [\mathbf{U}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{I}_{nm}^u + \mathbf{V}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{I}_{nm}^v], \quad (5.45)$$

$$\mathbf{J}(\mu, \varphi) = \sum_{n=0}^N \mathbf{U}_{n0}(\mu, \varphi) \mathbf{J}_{n0}^u + \sum_{m=1}^M \sum_{n=m}^N [\mathbf{U}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{J}_{nm}^u + \mathbf{V}_{nm}(\mu, \varphi) \mathbf{J}_{nm}^v], \quad (5.46)$$

а также (5.24), (5.43) и (5.44), получим соотношения между коэффициентами разложения функции источников и вектора Стокса:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{nm}^u &= \frac{\omega}{2} \mathbf{G}_n \mathbf{I}_{nm}^u + \frac{\omega}{2} \mathbf{G}_n \mathbf{U}_{nm}^T(-\mu_0, \varphi_0) \mathbf{F}_0 e^{-\tau_{\text{ext}}^{\text{sun}}} \\ &\quad + (1 - \omega) 2\sqrt{\pi} \mathbf{B} \delta_{n0} \delta_{m0}, \\ \mathbf{J}_{nm}^v &= \frac{\omega}{2} \mathbf{G}_n \mathbf{I}_{nm}^v + \frac{\omega}{2} \mathbf{G}_n \mathbf{V}_{nm}^T(-\mu_0, \varphi_0) \mathbf{F}_0 e^{-\tau_{\text{ext}}^{\text{sun}}}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Вычисляя скалярное произведение (5.45) на \mathbf{U}_{nm}^T и \mathbf{V}_{nm}^T , получим

$$\begin{aligned}\mathbf{I}_{nm}^u &= \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{U}_{nm}^T(\mu, \varphi) \mathbf{I}(\mu, \varphi) d\mu d\varphi, \quad m \geq 0, \\ \mathbf{I}_{nm}^v &= \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{V}_{nm}^T(\mu, \varphi) \mathbf{I}(\mu, \varphi) d\mu d\varphi, \quad m > 0.\end{aligned}\quad (5.48)$$

При $n = 0$ или $n = 1$: $[\mathbf{I}_{nm}^{u,v}]_2 = [\mathbf{I}_{nm}^{u,v}]_3 = 0$ и $[\mathbf{J}_{nm}^{u,v}]_2 = [\mathbf{J}_{nm}^{u,v}]_3 = 0$. Выражения (5.47) также являются обобщением соотношения 1 из [187], полученного для скалярного случая, на векторный. Однако здесь базисные ортогональные функции являются действительными.

5.5.4 Особенности реализации VSHDOM

Расчет в методе VSHDOM (The Vector Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method) может быть построен как через комплексные (5.35), так и через действительные (5.42) обобщенные сферические функции. Уравнение переноса решается итерационно. При этом используется представление вектора Стокса и функции источников через сферические функции и дискретные ординаты. Каждая итерация состоит из 4 шагов:

1. переход от представления функции источников через сферические гармоники к дискретным ординатам с помощью (5.39) или (5.46);
2. интегрирование функции источников вдоль ординаты для расчета вектора Стокса;
3. переход от представления вектора Стокса через дискретные ординаты к обобщенным сферическим гармоникам с помощью (5.41) или (5.48);
4. расчет коэффициентов разложения функции источников по сферическим функциям через (5.40) или (5.47).

Вектор Стокса на шаге 2 рассчитывается через интегральную форму уравнения переноса:

$$\begin{aligned}[\mathbf{I}(s)]_{kp} &= [\mathbf{I}(0)]_{kp} e^{-\int_0^s \sigma_{\text{ext}}(s') ds'} \\ &+ \int_0^s [\mathbf{S}(s')]_{kp} e^{-\int_{s'}^s \sigma_{\text{ext}}(s'') ds''} ds',\end{aligned}\quad (5.49)$$

где $[\mathbf{I}]_{kp}$ – это k -тый компонент вектора Стокса \mathbf{I}_p , соответствующий направлению $\boldsymbol{\Omega}_p$ дискретной ординаты; $\mathbf{S} = \sigma_{\text{ext}} \mathbf{J}$. Как и в [187], интегрирование (5.49) осуществляется в предположении, что коэффициент экстинкции и произведение коэффициента экстинкции на функцию источников являются линейными функциями по s .

В VSHDOM реализован алгоритм адаптивной сетки. В нем расчетная ячейка делится пополам по всем трем направлениям декартовой системы координат, если изменение произведения коэффициента экстинкции на функцию источников в ячейке больше заданного значения. В векторном случае это изменение, усредненное по всем углам, имеет вид:

$$\Delta J = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \left\| \sigma_{\text{ext}}^{(2)} \mathbf{J}^{(2)}(\mu, \varphi) - \sigma_{\text{ext}}^{(1)} \mathbf{J}^{(1)}(\mu, \varphi) \right\|^2 d\mu d\varphi,$$

где $\sigma_{\text{ext}}^{(p)}$ и $\mathbf{J}^{(p)}$, $p = 1, 2$ соответствуют точкам на границе ячейки. Принимая во внимание

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{J}^{(p)\text{H}}(\mu, \varphi) \mathbf{J}^{(q)}(\mu, \varphi) d\mu d\varphi \\ &= \sum_{nm} \sum_{n'm'} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{J}_{nm}^{(p)\text{H}} \mathbf{Y}_{nm}^{\text{H}}(\mu, \varphi) \mathbf{Y}_{n'm'}(\mu, \varphi) \mathbf{J}_{n'm'}^{(q)} d\mu d\varphi = \sum_{nm} \mathbf{J}_{nm}^{(p)\text{H}} \mathbf{J}_{nm}^{(q)}, \end{aligned}$$

где $p, q = 1, 2$, получаем, что, как и в скалярном случае, ΔJ выражается через коэффициенты разложения функции источников

$$\Delta J = \sum_{nm} \left\| \sigma_{\text{ext}}^{(2)} \mathbf{J}_{nm}^{(2)} - \sigma_{\text{ext}}^{(1)} \mathbf{J}_{nm}^{(1)} \right\|^2.$$

Для запуска итерационной схемы необходимо предварительно инициализировать значения вектора Стокса в каждом расчетном узле. Для этого решается скалярная задача в приближении независимых столбцов, а Q , U и V зануляются. В качестве альтернативы можно использовать векторную одномерную модель, например, MVDOM [246], VDOME [243] или VLIDORT [354]. В последнем случае вектор Стокса рассчитывается как

$$\mathbf{I}(\mu, \varphi) = \sum_{m=0}^M \mathbf{I}_m^{\text{c}}(\mu) \cos m(\varphi - \varphi_0) + \mathbf{I}_m^{\text{s}}(\mu) \sin m(\varphi - \varphi_0),$$

где $\mathbf{I}_m^{\text{c}} = [I_m^{\text{c}}, Q_m^{\text{c}}, 0, 0]^{\text{T}}$ и $\mathbf{I}_m^{\text{s}} = [0, 0, U_m^{\text{s}}, V_m^{\text{s}}]^{\text{T}}$. Далее, для комплексной версии VSHDOM при $m = 0$

$$\mathbf{I}_{n0} = \sqrt{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{P}_{n0}(\mu) \mathbf{T}^* \mathbf{I}_0^{\text{c}}(\mu) d\mu \quad (5.50)$$

и при $m > 0$

$$\begin{aligned}\mathbf{I}_{nm} &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_{-1}^1 \mathbf{P}_{nm}(\mu) \mathbf{T}^* [\mathbf{I}_m^c(\mu) - j\mathbf{I}_m^s(\mu)] e^{-jm\varphi_0} d\mu, \\ \mathbf{I}_{n-m} &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_{-1}^1 \mathbf{P}_{n-m}(\mu) \mathbf{T}^* [\mathbf{I}_m^c(\mu) + j\mathbf{I}_m^s(\mu)] e^{jm\varphi_0} d\mu.\end{aligned}\quad (5.51)$$

Для действительной версии VSHDOM при $m = 0$

$$\mathbf{I}_{n0}^u = \sqrt{2\pi} \int_{-1}^1 \mathbf{P}_{n0}(\mu) \mathbf{I}_0^c(\mu) d\mu \quad (5.52)$$

и при $m > 0$

$$\begin{aligned}\mathbf{I}_{nm}^u &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_{-1}^1 \mathbf{P}_{nm}(\mu) [\mathbf{I}_m^c(\mu) \cos m\varphi_0 - \mathbf{I}_m^s(\mu) \sin m\varphi_0] \\ &\quad - \mathbf{D} \mathbf{P}_{nm}(\mu) [\mathbf{I}_m^c(\mu) \sin m\varphi_0 + \mathbf{I}_m^s(\mu) \cos m\varphi_0] d\mu, \\ \mathbf{I}_{nm}^v &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \int_{-1}^1 \mathbf{P}_{nm}(\mu) [\mathbf{I}_m^c(\mu) \sin m\varphi_0 + \mathbf{I}_m^s(\mu) \cos m\varphi_0] \\ &\quad + \mathbf{D} \mathbf{P}_{nm}(\mu) [\mathbf{I}_m^c(\mu) \cos m\varphi_0 - \mathbf{I}_m^s(\mu) \sin m\varphi_0] d\mu.\end{aligned}\quad (5.53)$$

5.5.5 Верификация прямой модели

Расчеты, представленные в этой части, выполнены при 330 нм. Для проверки VSHDOM рассмотрим две плоско-параллельные задачи. В первой задаче имеется прямоугольная расчетная область 2×1 км ($x - z$) только с релеевским рассеянием. Угол падения 30° . Нижнее граничное условие описывается ламбертовским законом отражения с альбедо поверхности 0.1. Основная сетка имеет $(N_x = 11) \times (N_z = 11)$ точек. Число дискретных ординат равно $(N_\mu = 16) \times (N_\varphi = 32)$. Релеевская матрица рассеяния была рассчитана согласно [353]. Во второй тестовой задаче коэффициент экстинкции меняется по высоте как $\sigma_{\text{ext}}(z) = 2z + 0.01$ км $^{-1}$. Фазовая матрица соответствует модели «cumulus maritime cloud» из [39] с модифицированным гамма-распределением частиц по размерам

$$p(a) \propto a^\alpha \exp \left[-\frac{\alpha}{\gamma} \left(\frac{a}{a_{\text{mod}}} \right)^\gamma \right],$$

при $a_{\text{mod}} = 10.4$ мкм, $\alpha = 4$ и $\gamma = 2.34$. Размер частиц лежит в диапазоне $0.02 \div 50.0$ мкм. В расчетах используется адаптивная сетка. Эталонное решение рассчитывается с помощью одномерных векторных кодов MVDOM и VDOME. I - и Q - компоненты вектора Стокса для

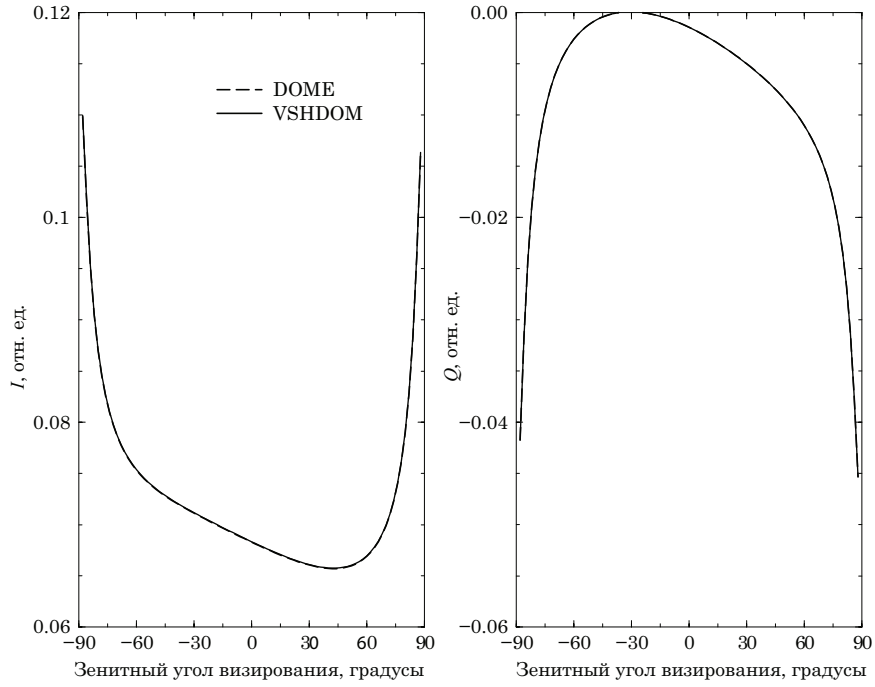


Рисунок 5.14 — I – и Q – компоненты вектора Стокса на верхней границе релеевской атмосферы.

релеевской атмосферы показаны на рисунке 5.14 и для атмосферы с облаком на рисунке 5.15. Так как MVDOM и VDOME совпадают до шести значащих цифр, на графиках их решения обозначены как «1D». На представленных графиках видно, что решение VSHDOM совпадает с решением одномерной задачи.

На рисунке 5.16 показаны относительные ошибки решений для I и Q на основной и адаптивной сетках. Для I -компоненты адаптивная сетка на порядок увеличивает точность расчета. Для Q -компоненты максимальная ошибка равна 20% на основной сетке и 5 % на адаптивной сетке.

Рассмотрим неоднородную по горизонтали задачу. Расчетная область 3.15×2 км содержит водяное облако толщиной 0.5 км. Верхняя граница облака на высоте 1.6 км. Модель облака «stratus continental cloud» из [39] с $a_{\text{mod}} = 4.7$ мкм, $\alpha = 5$ и $\gamma = 1.05$. Зависимость коэффициента экстинкции от горизонтальной координаты описывается моделью ограниченного каскада [323] шестого порядка с дисперсией 0.3 и коэффициентом уменьшения дисперсии 0.8. Среднее значение коэффициента экстинкции равно 2.0 км^{-1} . Также в атмосфере происходит релеевское рассеяние. В расчетах используется сетка по углам $(N_\mu = 16) \times (N_\varphi = 32)$ и три сетки по координатам с различным пространственным разрешением: (1) $\Delta x = 5 \cdot 10^{-2}$ км ($N_x = 64$ точки), $\Delta z_{\text{clear}} = 1 \cdot 10^{-1}$ км, $\Delta z_{\text{cloud}} = 5 \cdot 10^{-2}$ км, (2) $\Delta x \approx 2.5 \cdot 10^{-2}$ км ($N_x = 128$ точек), $\Delta z_{\text{clear}} = 5 \cdot 10^{-2}$ км, $\Delta z_{\text{cloud}} = 2.5 \cdot 10^{-2}$ км, и (3) $\Delta x \approx 1.25 \cdot 10^{-2}$ км ($N_x = 256$ точек),

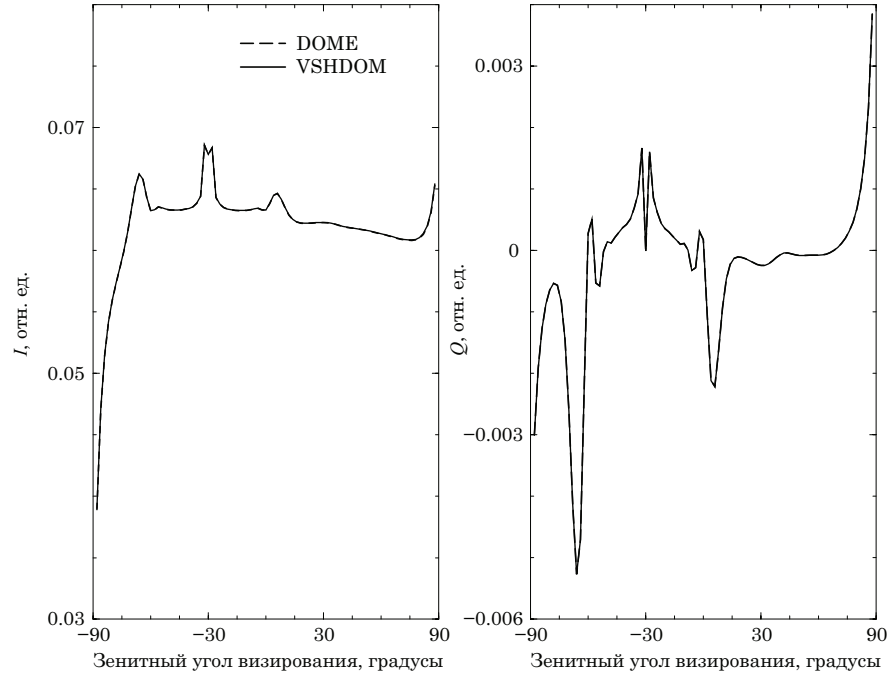


Рисунок 5.15 — I – и Q – компоненты вектора Стокса на верхней границе атмосферы с облаком.

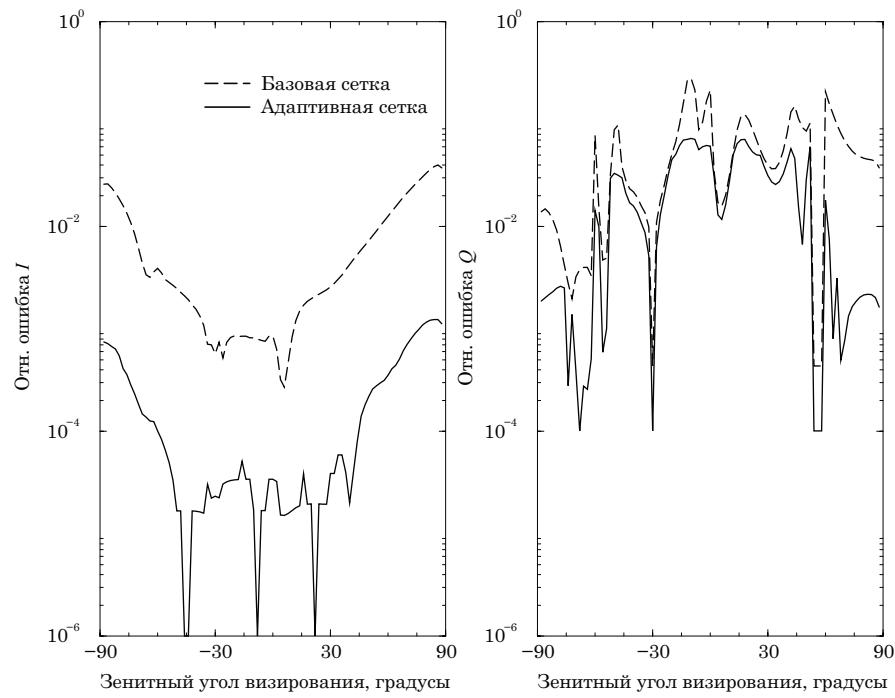


Рисунок 5.16 — Относительные ошибки для I – и Q –компонент на основной и адаптивной сетках на верхней границе атмосферы с облаком.

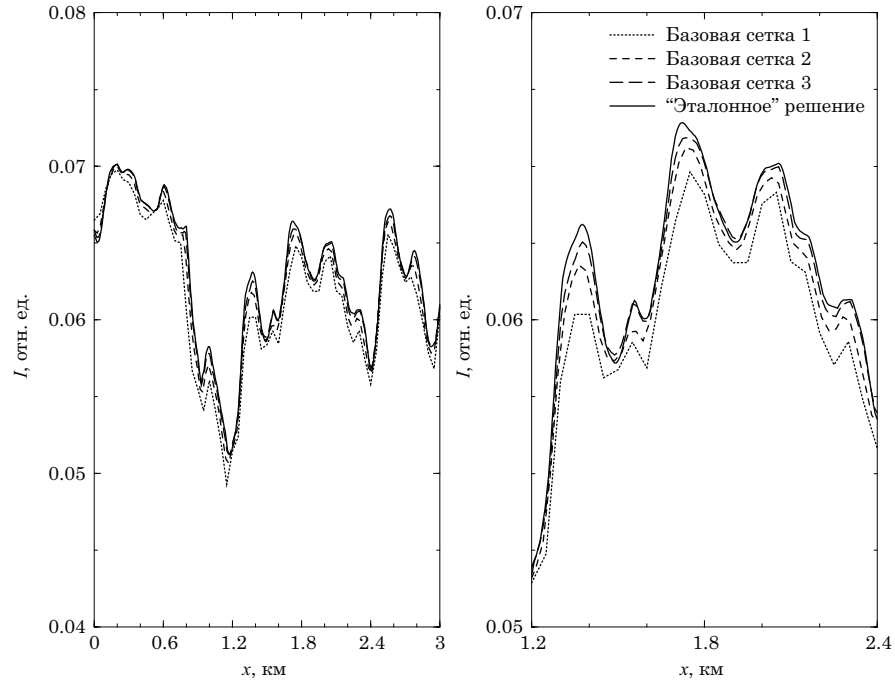


Рисунок 5.17 — I -компонента вектора Стокса на верхней границе атмосферы с облаком «stratus continental cloud». Зенитный угол визирования 0° . Расчеты выполнены без адаптивной сетки.

$\Delta z_{\text{clear}} = 2.5 \cdot 10^{-2}$ км, $\Delta z_{\text{cloud}} = 1.25 \cdot 10^{-2}$ км. Δz_{clear} и Δz_{cloud} обозначают пространственное разрешение сетки по оси z в чистом небе и облаке, соответственно. Эталонное решение получено при $(N_\mu = 32) \times (N_\varphi = 64)$, $\Delta x \approx 6.15 \cdot 10^{-3}$ км ($N_x = 512$ точки), $\Delta z_{\text{clear}} = 1.25 \cdot 10^{-2}$ км и $\Delta z_{\text{cloud}} = 6.25 \cdot 10^{-3}$ км. На рисунках 5.17 и 5.18 показаны I - и Q -компоненты вектора Стокса, соответственно. На графиках видно, что решение приближается к эталонному с ростом пространственного разрешения сетки.

В VSHDOM также реализована модель независимых столбцов (independent column approximation (ICA)), основанная на решении одномерного уравнения переноса для каждого вертикального столбца сетки. При этом отметим особенности реализации:

1. прямое солнечное излучение рассчитывается в многомерной модели для каждой точки сетки;
2. параметры Стокса определяются во всех точках сетки и для всех направлений дискретных ординат μ_p с помощью VDOME;
3. коэффициенты разложения вектора Стокса рассчитываются по формулам (5.50)-(5.51), или (5.52)-(5.53), а коэффициенты разложения функции источников рассчитываются через (5.40) или (5.47),

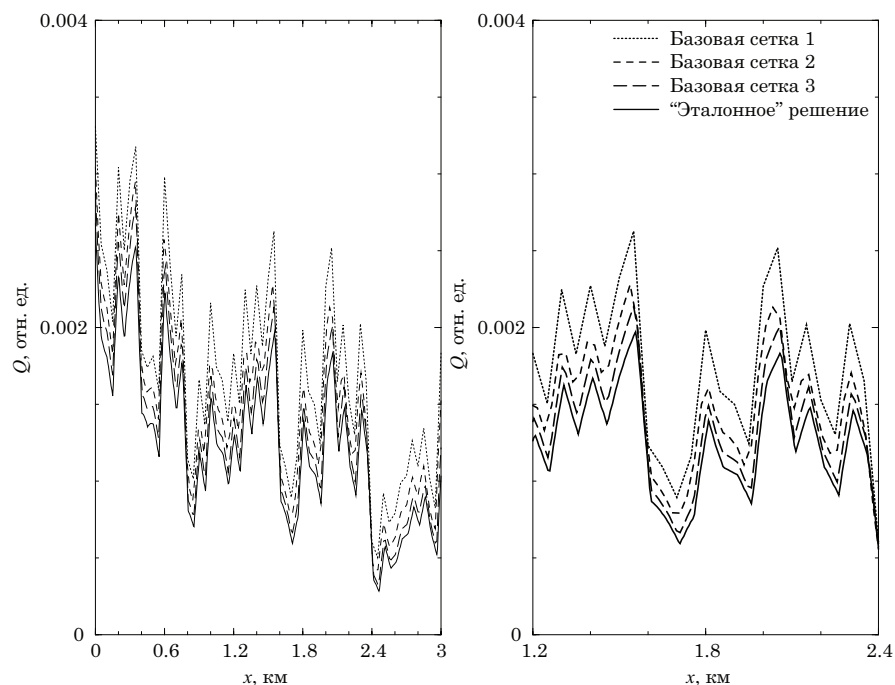


Рисунок 5.18 — Q -компонента вектора Стокса на верхней границе атмосферы с облаком «stratus continental cloud». Зенитный угол визирования 0° . Расчеты выполнены без адаптивной сетки.

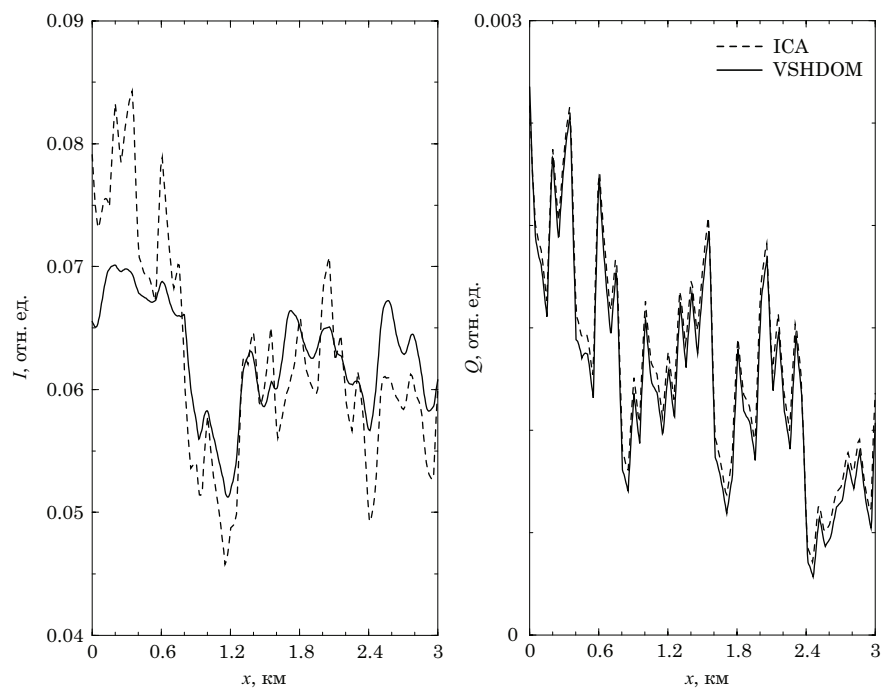


Рисунок 5.19 — I – и Q –компоненты вектора Стокса на верхней границе атмосферы с облаком «stratus continental cloud», рассчитанные в модели независимых столбцов (ICA) и в двумерной модели с помощью VSHDOM. Зенитный угол визирования 0° . Расчеты выполнены на третьей основной сетке без адаптивной сетки.

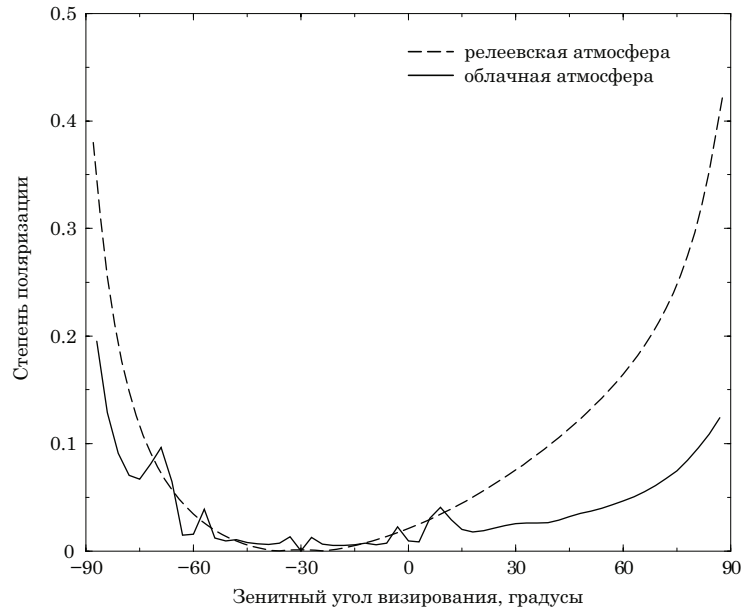


Рисунок 5.20 — Степень поляризации для релеевской атмосферы и атмосферы с облаком «stratus continental cloud» на верхней границе атмосферы. Расчет выполнен на третьей основной сетке.

4. вектор Стокса в заданном направлении определяется с помощью интегральной формы уравнения переноса в многомерной модели (5.49).

На рисунке 5.19 показаны I – и Q –компоненты, рассчитанные в модели ICA и VSHDOM. Видно, что расхождение в Q –компоненте мало. Относительные ошибки решения, усредненного по оси x и зенитному углу визирования, приведены в Таблице 5.3. Отметим также, что ошибка ICA модели для I -компоненты находится на уровне 12% с ростом пространственного разрешения, ошибка для Q –компоненты уменьшается с 25% к 7%; ошибка решения VSHDOM уменьшается с ростом пространственного разрешения, при этом адаптивная сетка существенно улучшает точность, особенно для I –компоненты.

На рисунке 5.20 показана степень поляризации, усредненная по оси x для релеевской атмосферы и атмосферы с облаком. Как и ожидалось, степень поляризации для атмосферы с облаком меньше чем для релеевской атмосферы. Отметим, что при отражении на -30° степень поляризации почти равна нулю.

При решении задачи по восстановлению концентрации озона поляризационные эффекты учитываются с помощью поляризационной коррекции. Эта поправка равна разнице между полной интенсивностью, рассчитанной в векторной модели, и полной интенсивностью, рассчитанной в скалярной модели. Относительная разница между решениями VSHDOM и SHDOM, усредненная по оси x , показана на рисунке 5.21. На графике видно, что для релеевской атмосферы максимальное расхождение равно 8%; для атмосферы с облаком расхождение меньше

Таблица 5.3 — Средние относительные ошибки для I - и Q - компонент

№ сетки	Метод	Относительная ошибка	
		I	Q
1	ICA	1.42e-1	2.49e-1
	VSHDOM	4.42e-2	2.04e-1
	основная сетка		
	VSHDOM	2.28e-2	1.68e-1
2	ICA	1.29e-1	1.23e-1
	VSHDOM	2.47e-2	1.11e-1
	основная сетка		
	VSHDOM	1.21e-2	9.05e-2
3	ICA	1.25e-1	7.14e-2
	VSHDOM-основная	8.15e-3	6.61e-2
	сетка		
	VSHDOM-	5.15e-3	5.68e-2
	адаптивная сетка		

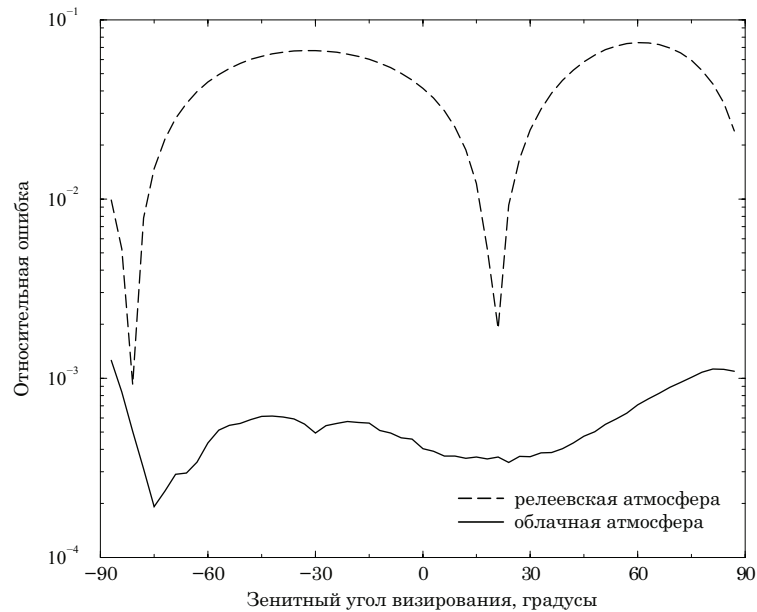


Рисунок 5.21 — Относительная разница между I -компонентами вектора Стокса, рассчитанными с помощью VSHDOM и SHDOM. Расчеты выполнены для релеевской атмосферы и атмосферы с облаком «stratus continental cloud».

0.1%. Таким образом, для атмосферы с облаком можно пользоваться скалярной моделью без соответствующих поправок на поляризационные эффекты.

5.6 Линеаризация SHDOM

5.6.1 Постановка задачи

Восстановление состава атмосферы в областях, где проходит граница облачности, требует учета пространственной неоднородности. Приборная погрешность становится меньше методической погрешности, обусловленной использованием одномерных моделей [355, 356]. Для будущих миссий необходим аналитический инструмент анализа неоднородной атмосферы. Эта часть посвящена алгоритму расчета матрица Якоби от решения SHDOM по искомым параметрам.

Рассмотрим процесс переноса излучения через прямоугольный параллелепипед с длинами рёбер L_x , L_y и L_z , как показано на рисунке 5.22. Верхняя и нижняя грани обозначены через S_t и S_b , соответственно, а боковые грани обозначены через S_{1x} ($x = 0$), S_{2x} ($x = L_x$), S_{1y} ($y = 0$) и S_{2y} ($y = L_y$). Запишем уравнение переноса для I в точке \mathbf{r} в направлении $\boldsymbol{\Omega} = (\mu, \varphi)$ в операторной форме

$$(\mathcal{L}I)(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}), \quad (5.54)$$

где в случае ламбертовской подложки оператор переноса \mathcal{L} для прямой задачи и функция источников Q имеют вид:

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}I)(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = & \frac{dI}{ds}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - \frac{\sigma_{\text{sct}}(\mathbf{r})}{4\pi} \int_{4\pi} P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega' \\ & - \frac{A}{\pi} \delta(z - z_b) H(\mu) \mu \int_{4\pi} H(-\mu') |\mu'| I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega' \end{aligned} \quad (5.55)$$

и

$$Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = F_0 \mu_0 \delta(z - z_t) \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_0), \quad (5.56)$$

соответственно. $\boldsymbol{\Omega}_0 = (-\mu_0, \varphi_0)$, $\mu_0 > 0$ – направление падающего солнечного излучения, F_0 – солнечный поток. δ – дельта-функция, H – функция Хевисайда. Дополним уравнение (5.54) однородными граничными условиями на верхней и нижней гранях

$$I(\mathbf{r}_t, \boldsymbol{\Omega}^-) = 0 \text{ и } I(\mathbf{r}_b, \boldsymbol{\Omega}^+) = 0 \quad (5.57)$$

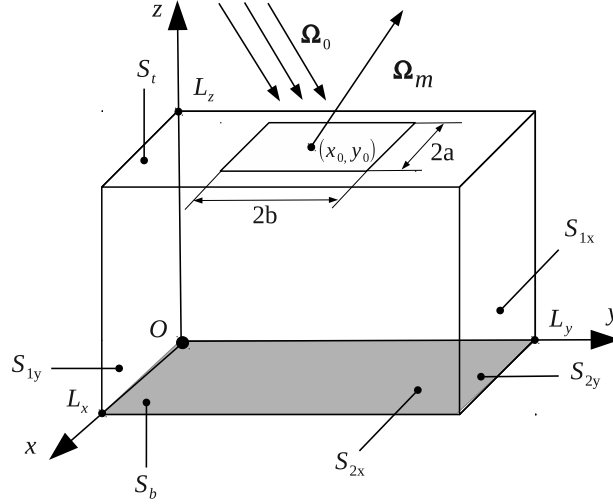


Рисунок 5.22 — Иллюстрация постановки задачи в трехмерном случае.

и периодическими граничными условиями на боковых границах

$$I(\mathbf{r}_{1x}, \Omega) = I(\mathbf{r}_{2x}, \Omega) \text{ и } I(\mathbf{r}_{1y}, \Omega) = I(\mathbf{r}_{2y}, \Omega). \quad (5.58)$$

В (5.57) Ω^+ и Ω^- обозначают восходящее и нисходящее направления, соответственно, а \mathbf{r}_t и \mathbf{r}_b указывают на точки, расположенные на гранях S_t и S_b , соответственно. Смысл величин \mathbf{r}_{1x} , \mathbf{r}_{2x} , \mathbf{r}_{1y} и \mathbf{r}_{2y} в (5.58) определяется аналогично.

Сопряженный оператор переноса \mathcal{L}^\dagger вводится через соотношение

$$\langle \mathcal{L}I, I^\dagger \rangle = \langle I, \mathcal{L}^\dagger I^\dagger \rangle, \quad (5.59)$$

где скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают скалярное произведение. Под скалярным произведением функций I_1 и I_2 понимается следующий интеграл

$$\langle I_1, I_2 \rangle = \int_V \int_{4\pi} I_1(\mathbf{r}, \Omega) I_2(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega dV, \quad (5.60)$$

где V — объем прямоугольного параллелепипеда. Сопряженные граничные условия для I^\dagger имеют вид

$$I^\dagger(\mathbf{r}_t, \Omega^+) = 0, \quad I^\dagger(\mathbf{r}_b, \Omega^-) = 0 \quad (5.61)$$

и (5.58). Тогда выражение для сопряженного оператора имеет вид

$$\begin{aligned}
(\mathcal{L}^\dagger I^\dagger)(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = & -\frac{dI^\dagger}{ds}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) I^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - \frac{\sigma_{\text{sct}}(\mathbf{r})}{4\pi} \int_{4\pi} P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega}) I^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega' \\
& - \frac{A}{\pi} \delta(z - z_b) H(-\mu) |\mu| \int_{4\pi} H(\mu') \mu' I^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega'.
\end{aligned} \tag{5.62}$$

Уравнение переноса в неоднородной трехмерной среде обычно решается численно. Расчетная область дискретизуется, причем в каждой точке основной расчетной сетки считаются известными атмосферные параметры, такие как коэффициент экстинкции, альbedo однократного рассеяния и коэффициенты разложения индикатрисы рассеяния по полиномам Лежандра. Значения этих параметров внутри ячейки определяются с помощью интерполяции между значениями в узлах ячейки. При этом I является функцией вектора состояния \mathbf{p} , включающего значения параметров атмосферы в узлах основной сетки, т.е. $I = I(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$. Целью дальнейшего рассмотрения является построение процедуры расчета частной производной $\partial I / \partial p_i$.

Рассчитать $\partial I / \partial p_i$ можно, линеаризовав SHDOM тем же способом, каким линеаризован MDOM в Главе 2. Частные производные вычисляются аналитически с помощью правила цепного дифференцирования – от выходной функции I к входным параметрам кода. Этот метод может быть реализован без дополнительного теоретического анализа, хотя и требует значительного времени и работы на разработку кода. В дальнейшем будем называть такой метод SHDOM-AD (аналитическое дифференцирование). Соответствующий код был разработан. В виду отсутствия особенностей в процедуре такой линеаризации, мы не будем останавливаться на нем и вернемся к нему только в разделе 5.7, посвященном численным расчетам.

Далее мы рассмотрим процедуру линеаризации в многомерном случае через сопряженный оператор переноса.

5.6.2 Линеаризация SHDOM через сопряженный оператор переноса

Часто при решении практических задач, связанных с уравнением переноса, необходимо знать не само решение I , а некий радиационный эффект E , выражаемый как

$$E = \langle Q^\dagger, I \rangle, \tag{5.63}$$

где Q^\dagger – соответствующая функция отклика. Основным результатом теории сопряженных уравнений переноса [109] является следующее утверждение: если I является решением уравнения $\mathcal{L}I = Q$ с граничными условиями (5.57) и (5.58), I^\dagger является решением сопряженного уравнения $\mathcal{L}^\dagger I^\dagger = Q^\dagger$ с граничными условиями (5.61) и (5.58), а радиационный эффект E может быть рассчитан как скалярное произведение функции I (определенной через Q) и функции отклика Q^\dagger , то тот же радиационный эффект равен скалярному произведению решения сопряженной задачи I^\dagger (определенной через Q^\dagger) и функции источников прямой задачи Q :

$$E = \langle Q^\dagger, I \rangle = \langle \mathcal{L}^\dagger I^\dagger, I \rangle = \langle I^\dagger, \mathcal{L}I \rangle = \langle I^\dagger, Q \rangle. \quad (5.64)$$

Далее интеграл от частной производной по некоторому атмосферному параметру p_i , $i = 1, \dots, n$,

$$D_i = \left\langle Q^\dagger, \frac{\partial I}{\partial p_i} \right\rangle \quad (5.65)$$

может быть вычислен как

$$D_i = \left\langle Q^\dagger, \frac{\partial I}{\partial p_i} \right\rangle = \left\langle \mathcal{L}^\dagger I^\dagger, \frac{\partial I}{\partial p_i} \right\rangle = \left\langle I^\dagger, \mathcal{L} \frac{\partial I}{\partial p_i} \right\rangle. \quad (5.66)$$

Для последнего равенства мы используем тот факт, что $\partial I / \partial p_i$ удовлетворяет условиям (5.57) и (5.58). Если $\partial Q^\dagger / \partial p_i = 0$, то $D_i = \partial E / \partial p_i$. Дифференцируя уравнение $\mathcal{L}I = Q$ по параметру p_i с учетом $\partial Q / \partial p_i = 0$ получим

$$D_i = - \left\langle I^\dagger, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p_i} I \right\rangle. \quad (5.67)$$

Далее рассмотрим функцию отклика, соответствующую следующей ситуации. Детектор с конечным полем зрения измеряет интенсивность на верхней границе атмосферы в направлении $\mathbf{\Omega}_m = (\mu_m, \varphi_m)$, $\mu_m > 0$. По сути детектор интегрирует сигнал по полю зрения инструмента. Если чувствительность детектора и аппаратная функция постоянны в поле зрения, то измеренный сигнал пропорционален усредненной по x, y яркости

$$E(\mathbf{p}, x_0, y_0, a, b) = \frac{1}{4ab} \int_{x_0-a}^{x_0+a} \int_{y_0-b}^{y_0+b} I(\mathbf{p}, x, y, z_t, \mathbf{\Omega}_m) dx dy, \quad (5.68)$$

где x_0 и y_0 – координаты оптической оси детектора. Для простоты предположим, что в детектор приходит сигнал с прямоугольной области с длинами $2a$ и $2b$ с центром в (x_0, y_0) . В этом случае радиационным эффектом будет усредненная по координатам x, y интенсивность,

а функция отклика (или сопряженная функция источников) имеет вид

$$Q^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = F_0^\dagger(x, y) \mu_m \delta(z - z_t) \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_m), \quad (5.69)$$

где

$$F_0^\dagger(x, y) = \frac{1}{4ab\mu_m} d_a(x_0, x) d_b(y_0, y), \quad (5.70)$$

$$d_a(x_0, x) = \begin{cases} 1, & x_0 - a \leq x \leq x_0 + a \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}. \quad (5.71)$$

С физической точки зрения сопряженная функция источников соответствует коллимированному пучку, распространяющемуся в направлении, совпадающем с направлением измерения, и имеющему конечную горизонтальную протяженность в пределах прямоугольной области измерений³. С учетом

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{2a} d_a(x_0, x) = \delta(x - x_0) \quad (5.72)$$

можно получить, что

$$\lim_{a, b \rightarrow 0} E(\mathbf{p}, x_0, y_0, a, b) = I(\mathbf{p}, x_0, y_0, z_t, \boldsymbol{\Omega}_m). \quad (5.73)$$

Таким образом, в пределе $a, b \rightarrow 0$ радиационным эффектом будет функция яркости на верхней границе атмосферы в точке (x_0, y_0) , а сопряженная функция источников соответствует лучу, исходящему из точки (x_0, y_0) .

Таким образом, чтобы рассчитать производную D_i , мы должны решить прямую и сопряженную задачи, а затем найти скалярное произведение (5.67). Точность нахождения производных в рамках линеаризованного SHDOM определяется точностью вычисления скалярного произведения и решения сопряженной задачи. Эти вопросы мы рассмотрим далее. Сейчас же заметим, что уравнения для прямой задачи $\mathcal{L}I = Q$ и сопряженной задачи $\mathcal{L}^\dagger I^\dagger = Q^\dagger$ связаны друг с другом. Заменяя $\boldsymbol{\Omega}$ на $-\boldsymbol{\Omega}$ в выражении для сопряженного оператора \mathcal{L}^\dagger , получим $\mathcal{L}^\dagger(-\boldsymbol{\Omega})I^\dagger(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) = Q^\dagger(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega})$. Определяя функцию⁴ \hat{I}^\dagger как $\hat{I}^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = I^\dagger(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega})$ и используя свойства симметрии индикатрисы $P(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}, -\boldsymbol{\Omega}') = P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega})$, получаем равенство $\mathcal{L}^\dagger(-\boldsymbol{\Omega})I^\dagger(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) = \mathcal{L}\hat{I}^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$. Таким образом, \hat{I}^\dagger является решением того же типа уравнения

³Другая ситуация рассмотрена в [357]: точечный детектор делает серию измерений $I_m(x_j, y_j, z_t, \boldsymbol{\Omega}_m)$ на верхней границе атмосферы в точках (x_j, y_j) , $j = 1, \dots, m$, в направлении $\boldsymbol{\Omega}_m$. Как и в нашем примере, сопряженная функция источников соответствует мононаправленному источнику конечной горизонтальной протяженности, соответствующей области, в которой проводятся измерения.

⁴Функцию \hat{I}^\dagger следовало бы назвать сопряженной в значении «conjugate». Однако термин «сопряженный» уже использовано для «adjoint».

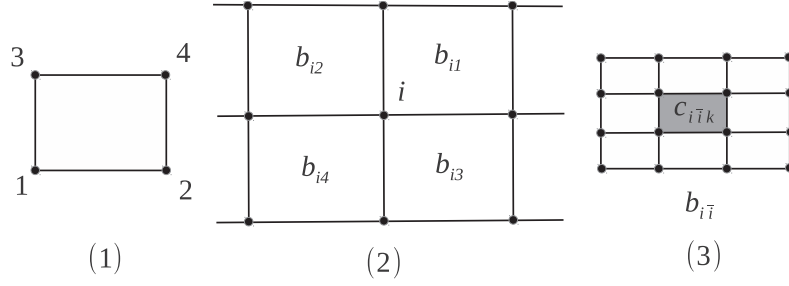


Рисунок 5.23 — (1) Схема нумерации точек одной ячейки. (2) Точка i основной сетки и соседние ячейки $b_{i\bar{i}}$, $\bar{i} = 1, \dots, 4$. (3) Ячейка основной сетки $b_{i\bar{i}}$ делится при построении адаптивной сетки на $N_{i\bar{i}}$ ячеек $c_{i\bar{i}k}$, $k = 1, \dots, N_{i\bar{i}}$.

как и I , то есть, $\mathcal{L}\hat{I}^\dagger = \hat{Q}^\dagger$, где соответствующая функция источников определяется как $\hat{Q}^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) = Q^\dagger(\mathbf{r}, -\Omega)$.

5.6.3 Вычисление скалярного произведения

В этой части мы рассмотрим практические аспекты расчета частных производных от радиационного эффекта по коэффициенту экстинкции. Производные по альбедо однократного рассеяния рассчитываются по аналогии.

Для того, чтобы рассчитать частные производные, требуются специальные интерполяционные схемы для коэффициента экстинкции, функции источников и значения яркости внутри ячейки. Основная проблема заключается в том, что SHDOM использует интегральную форму уравнения переноса и соответствующие интерполяционные схемы. К сожалению, ошибки указанных интерполяционных схем при использовании дифференциальной формы уравнения переноса больше ошибок при использовании интегральной формы. Поэтому для расчета I и $\frac{\partial I}{\partial p_i}$ необходимо использовать иные схемы.

Пусть σ_{ext}^i — коэффициент экстинкции в точке i основной сетки. За $b_{i\bar{i}}$ обозначим ячейку основной сетки, содержащую точку i , где \bar{i} равен номеру точки i в «схеме нумерации точек» одной ячейки (как показано на рисунках 5.23(1) и 5.23(2)). Предположим, что коэффициент экстинкции меняется линейно по ячейке базовой сетки:

$$\sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \sum_j L_j(\mathbf{r}) \sigma_{\text{ext}}^j, \quad (5.74)$$

где L_j — интерполяционные базисные функции первого порядка для элемента «прямоугольная призма», а σ_{ext}^j — соответствующие значения коэффициента экстинкции в узлах сетки. Для

произведения коэффициента экстинкции на функцию источников, имеющую вид

$$J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{\omega}{4\pi} \int_{4\pi} P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega', \quad (5.75)$$

есть несколько вариантов:

1. предположить линейную зависимость в ячейке основной сетки, т.е.

$$\sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_j L_j(\mathbf{r}) \sigma_{\text{ext}}^j J_j(\boldsymbol{\Omega}), \quad (5.76)$$

где J_j – значения функции источников в узлах базовой сетки;

2. положить $\sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = (\sum_j L_j(\mathbf{r}) \sigma_{\text{ext}}^j) J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$, а функцию источников представить в виде $J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_k L_k(\mathbf{r}) J_k(\boldsymbol{\Omega})$, или считать, что ω и P не меняются сильно в ячейке, и положить

$$J(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{\omega_i}{4\pi} \int_{4\pi} P_i(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega', \quad I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_k L_k(\mathbf{r}) I_k(\boldsymbol{\Omega}). \quad (5.77)$$

Предполагая (5.74) и (5.76), получим

$$\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \sigma_{\text{ext}}^i} I \right)(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) \frac{\omega_i}{4\pi} \int_{4\pi} P_i(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I_i(\boldsymbol{\Omega}') d\Omega', \quad (5.78)$$

где $P_i(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') = P(\mathbf{r}_i, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}')$ и $d I_i(\boldsymbol{\Omega}') = I(\mathbf{r}_i, \boldsymbol{\Omega}')$, причем

$$\frac{\partial E}{\partial \sigma_{\text{ext}}^i} = - \sum_{\bar{i}} \int_{4\pi} \int_{V_{i\bar{i}}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) \hat{I}^\dagger(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) \left[I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - \frac{\omega_i}{4\pi} \int_{4\pi} P_i(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I_i(\boldsymbol{\Omega}') d\Omega' \right] dV d\Omega, \quad (5.79)$$

где суммирование производится по всем ячейкам $b_{i\bar{i}}$ основной сетки, содержащим точку i ; $V_{i\bar{i}}$ – объем ячейки $b_{i\bar{i}}$. На практике используется представление

$$I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = I_d(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + F_0 \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_0) T(\mathbf{r}), \quad (5.80)$$

где $T(\mathbf{r}) = \exp[-\tau_{\text{ext}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_t|, \boldsymbol{\Omega}_0)]$ – функция пропускания нерассеянной компоненты солнечного излучения, $\tau_{\text{ext}}(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \sigma_{\text{ext}}(\mathbf{r}) ds$ – оптическая толщина вдоль характеристики $\boldsymbol{\Omega}$ между начальной точкой \mathbf{r}_1 и конечной точкой \mathbf{r}_2 . Поступая по аналогии с

сопряженным решением

$$\widehat{I}^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \widehat{I}_d^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + F_0^\dagger \delta(\boldsymbol{\Omega} + \boldsymbol{\Omega}_m) T^\dagger(\mathbf{r}), \quad (5.81)$$

где $T^\dagger(\mathbf{r}) = \exp[-\tau_{\text{ext}}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_t|, -\boldsymbol{\Omega}_m)]$, получим

$$\frac{\partial E}{\partial \sigma_{\text{ext}}^i} = \sum_{\bar{i}} (T_{i\bar{i}}^0 + T_{i\bar{i}}^1 + T_{i\bar{i}}^2 + T_{i\bar{i}}^3), \quad (5.82)$$

где

$$\begin{aligned} T_{i\bar{i}}^0 &= F_0 F_0^\dagger \frac{\omega_i}{4\pi} P_i(\boldsymbol{\Omega}_m, \boldsymbol{\Omega}_0) T_i \int_{V_{i\bar{i}}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) T^\dagger(\mathbf{r}) dV, \\ T_{i\bar{i}}^1 &= -F_0^\dagger \int_{V_{i\bar{i}}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) I_d(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_m) T^\dagger(\mathbf{r}) dV + F_0^\dagger \frac{\omega_i}{4\pi} \int_{4\pi} P_i(\boldsymbol{\Omega}_m, \boldsymbol{\Omega}) I_d^i(\boldsymbol{\Omega}) \left[\int_{V_{i\bar{i}}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) T^\dagger(\mathbf{r}) dV \right] d\Omega, \\ T_{i\bar{i}}^2 &= -F_0 \int_{V_{i\bar{i}}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) \widehat{I}_d^\dagger(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}_0) T(\mathbf{r}) dV + F_0 \frac{\omega_i}{4\pi} \int_{4\pi} P_i(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}_0) T_i \left[\int_{V_{i\bar{i}}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) \widehat{I}_d^\dagger(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) dV \right] d\Omega, \\ T_{i\bar{i}}^3 &= - \int_{4\pi} \int_{V_{i\bar{i}}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) \widehat{I}_d^\dagger(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) \left[I_d(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - \frac{\omega_i}{4\pi} \int_{4\pi} P_i(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I_d^i(\boldsymbol{\Omega}') d\Omega' \right] dV d\Omega, \end{aligned} \quad (5.83)$$

$I_d^i(\boldsymbol{\Omega}) = I_d(\mathbf{r}_i, \boldsymbol{\Omega})$, $T_i = T(\mathbf{r}_i)$. $T_{i\bar{i}}^0$ и $T_{i\bar{i}}^1$ содержат сингулярности в F_0^\dagger . Это следствие того, что падающий поток излучения в сопряженной задаче имеет скачок (разрыв) в пространственном распределении. $T_{i\bar{i}}^2$ и $T_{i\bar{i}}^3$ описывают влияние сопряженного решения \widehat{I}_d^\dagger на производные для прямой задачи.

Слагаемые $T_{i\bar{i}}^0$, $T_{i\bar{i}}^1$, $T_{i\bar{i}}^2$ и $T_{i\bar{i}}^3$ рассчитываются в пространстве сферических гармоник с использованием разложений

$$I_d(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{lm} I_{lm}(\mathbf{r}) Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega}), \quad \widehat{I}_d^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{lm} \widehat{I}_{lm}^\dagger(\mathbf{r}) Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega}) \quad (5.84)$$

и

$$\frac{1}{4\pi} P(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') = \sum_{lm} \frac{\chi_l(\mathbf{r})}{2l+1} Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega}) Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega}'), \quad (5.85)$$

где Y_{lm} – ортонормированные действительные сферические функции и χ_l – коэффициенты разложения индикатрисы по полиномам Лежандра. С учетом линейной интерполяции $I_{lm}(\mathbf{r}) = \sum_j L_j(\mathbf{r}) I_{lm}^j$, $\widehat{I}_{lm}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_j L_j(\mathbf{r}) \widehat{I}_{lm}^{\dagger j}$, $T^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_j L_j(\mathbf{r}) T_j^\dagger$ и свойства $Y_{lm}(-\mathbf{\Omega}) = (-1)^l Y_{lm}(\mathbf{\Omega})$, получим

$$\begin{aligned} T_{ii}^0 &= F_0 F_0^\dagger \left(\sum_{lm} \omega_i \frac{\chi_l^i}{2l+1} Y_{lm}(\mathbf{\Omega}_m) Y_{lm}(\mathbf{\Omega}_0) \right) T_i(\mathbf{l}_{ii}^T \mathbf{t}^\dagger), \\ T_{ii}^1 &= -F_0^\dagger \sum_{lm} \left[(\mathbf{i}_{lm}^T \mathbf{L}_{ii} \mathbf{t}^\dagger) - \omega_i \frac{\chi_l^i}{2l+1} I_{lm}^i(\mathbf{l}_{ii}^T \mathbf{t}^\dagger) \right] Y_{lm}(\mathbf{\Omega}_m), \\ T_{ii}^2 &= -F_0 \sum_{lm} (-1)^l \left[(\widehat{\mathbf{i}}_{lm}^T \mathbf{L}_{ii} \mathbf{t}) - \omega_i \frac{\chi_l^i}{2l+1} T_i(\mathbf{l}_{ii}^T \widehat{\mathbf{l}}_{lm}^\dagger) \right] Y_{lm}(\mathbf{\Omega}_0), \\ T_{ii}^3 &= -\sum_{lm} (-1)^l \left[(\mathbf{i}_{lm}^T \mathbf{L}_{ii} \widehat{\mathbf{l}}_{lm}^\dagger) - \omega_i \frac{\chi_l^i}{2l+1} I_{lm}^i(\mathbf{l}_{ii}^T \widehat{\mathbf{l}}_{lm}^\dagger) \right], \end{aligned} \quad (5.86)$$

где $[\mathbf{i}_{lm}]_j = I_{lm}^j$, $[\widehat{\mathbf{i}}_{lm}^\dagger]_j = \widehat{I}_{lm}^{\dagger j}$ и $[\mathbf{t}^\dagger]_j = T_j^\dagger$, а элементы интерполяционной матрицы \mathbf{L}_{ii} и интерполяционного вектора \mathbf{l}_{ii} имеют вид

$$[\mathbf{L}_{ii}]_{jj'} = \int_{V_{ii}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) L_j(\mathbf{r}) L_{j'}(\mathbf{r}) dV, \quad (5.87)$$

$$[\mathbf{l}_{ii}]_j = \int_{V_{ii}} L_{\bar{i}}(\mathbf{r}) L_j(\mathbf{r}) dV, \quad (5.88)$$

соответственно.

Далее, радиационный эффект может быть рассчитан с помощью (5.63) или (5.64). В последнем случае радиационный эффект также раскладывается в ряд по сферическим функциям:

$$E = F_0 \mu_0 \int_{S_t} \widehat{I}_d^\dagger(x, y, z_t, -\mathbf{\Omega}_0) dS = F_0 \mu_0 \sum_{lm} (-1)^l \left[\int_{S_t} \widehat{I}_{lm}^\dagger(x, y, z_t) dS \right] Y_{lm}(\mathbf{\Omega}_0). \quad (5.89)$$

Интерполяционная матрица \mathbf{L}_{ii} и интерполяционный вектор \mathbf{l}_{ii} рассчитываются аналитически в локальной системе координат, привязанной к ячейке основной сетки. При построении адаптивной сетки ячейка основной сетки b_{ii} делится на N_{ii} суб-ячеек c_{iik} , $k = 1, \dots, N_{ii}$ (как

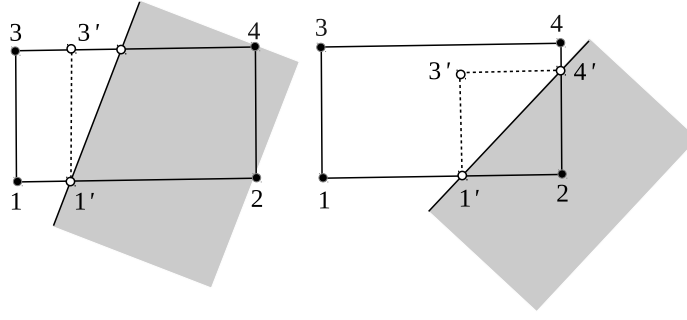


Рисунок 5.24 — «Обрезанные» ячейки $1'2'3'4'$ и $1'2'3'4'$, рассматриваемые при вычислении объемных интегралов для T_{ii}^0 и T_{ii}^1 . Исходная ячейка 1234 «разрезается» границей сопряженного падающего пучка. Область распространения пучка показана серым цветом.

показано на рисунке 5.23(3)). В результате объемный интеграл $\int_{V_{ii}}$ в (5.79) суммирует вклады всех суб-ячеек $\int_{V_{iik}}$, где V_{iik} — объем ячейки c_{iik} , а вектора ячейки \mathbf{i}_{lm} , $\hat{\mathbf{i}}_{lm}^\dagger$ и \mathbf{t}^\dagger , а также интерполяционная матрица \mathbf{L}_{iik} интерполяционный вектор \mathbf{l}_{iik} в (5.86) имеют отношение к суб-ячейке c_{iik} . Для того, чтобы учесть скачок в падающем потоке сопряженной задачи, объемные интегралы в выражениях для T_{ii}^0 и T_{ii}^1 , соответствующие ячейке, «разрезанной» границей падающего пучка, вычисляются по «обрезанной» ячейке, как показано на рисунке 5.24. Для этого необходимо знать значения $T^\dagger(\mathbf{r})$ в точках пересечения границ пучка и граней ячейки, а также выполнять интерполяцию $T(\mathbf{r})$ и $I_{lm}(\mathbf{r})$ в узлах «обрезанной» ячейки.

5.6.4 Решение сопряженного уравнения переноса

Основная сложность при решении сопряженного уравнения заключается в скачке в пространственном распределении падающего потока. В контексте метода дискретных ординат разрыв граничных условий приводит к двум проблемам: ложное рассеяние (false scattering) и лучевой эффект (ray effect). Ложное рассеяние ⁵ связано с пространственной дискретизацией. Оно возникает только в многомерных задачах и не имеет аналогов в одномерных задачах. Лучевой эффект возникает из-за использования дискретных ординат для описания непрерывного углового распределения излучения и не зависит от пространственной дискретизации. Обе эти проблемы рассмотрены в работах [358, 359] и предложено несколько способов решения этих проблем [360, 361].

В коде SHDOM используется метод интегрирования вдоль характеристики на основе интегральной формы уравнения переноса

$$I_d^A = I_d^B e^{-\int_0^{s_0} \sigma_{\text{ext}}(s) ds} + S(s_0, J_d), \quad (5.90)$$

⁵В англоязычной литературе также используются термины «numerical scattering» и «numerical smearing».

где I_d^B – интенсивность в точке B , s_0 – расстояние между A и B , а

$$S(J_d) = \int_0^{s_0} \sigma_{\text{ext}}(s) J_d(s) e^{-\int_s^{s_0} \sigma_{\text{ext}}(s') ds'} ds \quad (5.91)$$

– интеграл функции источников вдоль характеристики. Для краткости зависимость I_d и J_d от Ω явно не указана. Предполагая линейную зависимость для σ_{ext} и $\sigma_{\text{ext}} J_d$ вдоль характеристики, можно получить следующее выражение

$$S(s_0, J_d^A, J_d^B) = (1 - e^{-\tau}) \frac{1}{\sigma_{\text{ext}}^A + \sigma_{\text{ext}}^B} [\sigma_{\text{ext}}^A J_d^A + \sigma_{\text{ext}}^B J_d^B + \frac{2}{\sigma_{\text{ext}}^A + \sigma_{\text{ext}}^B} (\sigma_{\text{ext}}^B \sigma_{\text{ext}}^A J_d^A - \sigma_{\text{ext}}^A \sigma_{\text{ext}}^B J_d^B) \left(1 - \frac{2}{\tau} + \frac{2e^{-\tau}}{1 - e^{-\tau}}\right)]. \quad (5.92)$$

Как уже упоминалось, величины σ_{ext}^A , σ_{ext}^B , $\sigma_{\text{ext}}^A J_d^A$, $\sigma_{\text{ext}}^B J_d^B$ определяются с помощью линейной интерполяции между значениями в точках на гранях, пересекаемых характеристикой, а I_d^B также находится из линейной интерполяции между соседними узлами сетки.

Рассмотрим $J_d = J_{ss} + J_{ms}$, где J_{ss} и J_{ms} – функции источников, обусловленные однократным рассеянием и многократным рассеянием, соответственно. С учетом интегральной формы уравнения переноса излучения, получаем, что пространственное распределение и угловое распределение I_d имеют резкие градиенты (максимумы). В результате пространственное распределение J_{ms} имеет резкие изменения, в то время как острые максимумы в угловом распределении I_d сглаживаются при интегрировании по углам рассеяния. Таким образом, во всех ячейках, обрезанных границами падающего пучка, имеем:

1. ошибку интерполяции, потому что произведение коэффициента экстинкции на функцию источников и I_d^B не меняется линейно по ячейке;
2. ошибку интегрирования функции источников, так как произведение коэффициента экстинкции на функцию источников не меняется линейно вдоль характеристики (хотя мы это предполагали).

Для разностной схемы, используемой в SHDOM, влияние этих двух типов ошибок называют «ложным рассеянием». К счастью, две особенности кода SHDOM уменьшают их влияние:

1. Ошибка интерполяции меньше при использовании вместо схемы коротких характеристик схемы длинных характеристик, когда характеристика продлевается назад до тех пор, пока величина $\exp(-\tau)$ в (5.92) не станет меньше определенного значения или пока не достигнута граница расчетной области;

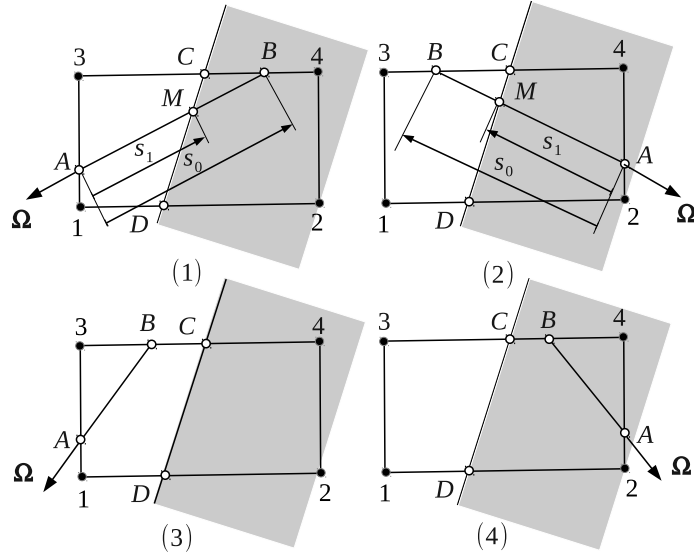


Рисунок 5.25 — Ячейка второго порядка с зонами «тень» (белая область) и «свет» (серая область).

2. Адаптивная сетка увеличивает пространственную дискретизацию там, где проходит граница падающего пучка. Если функция источников меняется слишком быстро в ячейке, то она делится на суб-ячейки. Адаптивная сетка уменьшает ошибку интерполяции функции источников и повышает точность интегрирования в ячейке.

Влияние «ложного рассеяния» может быть уменьшено также с помощью использования разностных схем высокого порядка. Рассмотрим

$$S(J_d) = S(J_{ss}) + S(J_{ms}), \quad (5.93)$$

где вклад от J_{ms} рассчитывается с помощью (5.92). Иллюстрация для расчета $S(J_{ss})$ показана на рисунке 5.25 для двухмерного случая. Требуется знать значения J_{ss} в точках пересечения граней ячейки с границами падающего пучка (то есть в точках C и D , которые играют роль дополнительных узловых точек в ячейке второго порядка). Возможны 4 ситуации:

1. Характеристика пересекает границу падающего пучка и идет из зоны «тень» в область с «светом» (на рисунке 5.25(1) из белой области в серую). В этом случае J_{ss}^B линейно интерполируется между J_{ss}^C и J_{ss}^D , при этом $S(J_{ss}) = S(s_0 - s_1, J_{ss}^M, J_{ss}^B)$, где J_{ss}^M линейно интерполируется между J_{ss}^C и J_{ss}^D , и $S(s_0 - s_1, J_{ss}^M, J_{ss}^B)$ рассчитывается по формуле (5.92), где вместо J_d^A и J_d^B подставляются J_{ss}^M и J_{ss}^B , соответственно.

2. Характеристика пересекает границу падающего пучка и идет из «света» в «тень» (см. рисунок 5.25(2)). Тогда J_{ss}^B линейно интерполируется между J_{ss}^3 и J_{ss}^C , и

$$S(J_{\text{ss}}) = S(s_1, J_{\text{ss}}^A, J_{\text{ss}}^M) e^{-\int_{s_1}^{s_0} \sigma_{\text{ext}}(s') ds'}, \quad (5.94)$$

где J_{ss}^M линейно интерполируется между J_{ss}^C и J_{ss}^D .

3. Характеристика остается в «тени» (см. рисунок 5.25(3)). Тогда $S(J_{\text{ss}}) = 0$.
4. Характеристика остается в «свете» (см. рисунок 5.25(4)). Тогда $S(J_{\text{ss}}) = S(s_0, J_{\text{ss}}^A, J_{\text{ss}}^B)$, где J_{ss}^B линейно интерполируется между J_{ss}^C и J_{ss}^4 .

Этот метод, именуемый в дальнейшем SHDOM-DDB (SHDOM with discontinuous direct beam), улучшает точность интерполяции J_{ss} и лучше учитывает разрывы J_{ss} вдоль характеристики. Однако он не устраняет ошибки интерполяции и интегрирования функции источников, связанные с J_{ms} . Поэтому метод по-прежнему должен быть использован в сочетании с методом длинных характеристик и адаптивной сеткой. В принципе, может быть построен алгоритм, в котором и J_{ms} , и яркость точнее интерполировались бы вдоль границ пучка.

Влияние ложного рассеяния и лучевого эффекта может быть малым при расчете E по формуле (5.89) и $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$ по формуле (5.79), так как для E и $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$ производится интегрирование по пространству. Например, для E в двухмерном случае интегрирование производится по оси x в области L_x . Кроме того, для $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$ требуется интегрирование по углу рассеяния.

5.7 Численные расчеты

Для исследования точности и эффективности линеаризованной версии SHDOM рассмотрим тестовую задачу в двухмерном случае с детектором с конечным полем зрения, находящимся на верхней границе атмосферы. Размер расчетной области 2.1×1 км ($x - z$). Значения коэффициента экстинкции вычисляются как

$$\sigma_{\text{ext}}(x, z) = 0.01 + \sigma_{\text{max}} \exp \left[-\frac{1}{2s_x^2} (x - \bar{x}) \right] \exp \left[-\frac{1}{2s_z^2} (z - \bar{z}) \right], \quad (5.95)$$

где $\bar{x} = 1.0$ км, $\bar{z} = 0.5$ км, $s_x = 0.5$ км, $s_z = 0.25$ км. Основная сетка имеет $(N_x = 21) \times (N_z = 11)$ точек, шаг дискретизации $\Delta x = \Delta z = 0.1$ км. $N_\varphi = 2N_\mu$, $\omega = 0.9$, индикатриса Henyey–Greenstein с параметром асимметрии 0.8. Используются периодические граничные

условия. Угол падения 60° . Нижние граничные условия – ламбертовский закон отражения с альбедо поверхности 0.2. Радиационный эффект E – усредненная по пространству яркость (5.68). Центр детектора расположен в точке $x_0 = 1.0$ км, $z_t = 1.0$ км. Длина интервала усреднения $2a = 2K_a\Delta x$. Производные рассчитываются по σ_{ext}^i в точках базовой сетки (x_i, z_d) , $x_i = (i - 1)\Delta x$, $i = 1, \dots, N_x$, $z_d = 5\Delta z$.

5.7.1 Линеаризованный SHDOM: аналитическое дифференцирование

На рисунке 5.26 показаны $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$ и соответствующая ошибка, рассчитанные с помощью SHDOM-AD. В качестве эталонной модели использовался SHDOM с конечными разностями (SHDOM-FD). Критерий деления ячейки для адаптивной сетки равен 10^{-3} , что соответствует методу коротких характеристик с $\exp(-\tau) = 1.0$ и методу длинных характеристик с $\exp(-\tau) = 0.1$. Относительная ошибка $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$, усредненная по x_i , равна 0.151 для метода коротких характеристик и $3.613 \cdot 10^{-3}$ для метода длинных характеристик. Относительная ошибка у E равна $8.455 \cdot 10^{-3}$ в первом случае и $1.770 \cdot 10^{-5}$ во втором случае. Можно сделать следующие выводы:

1. Точность метода коротких характеристик приемлема для расчета яркости. Для расчета производных метод коротких характеристик неточен, и должен быть использован метод длинных характеристик. Большая относительная ошибка метода коротких характеристик обусловлена малыми значениями производных.
2. SHDOM-AD с методом длинных характеристик дает очень точные результаты.

Далее при анализе линеаризованного SHDOM через сопряженное уравнение мы используем метод длинных характеристик. В качестве эталонной модели используется SHDOM-AD.

5.7.2 Линеаризованные SHDOM и SHDOM-DDB через сопряженное уравнение

Прямая и сопряженная задачи решаются последовательно для экономии памяти компьютера. Рассмотрим две техники дискретизации. В первом случае

1. решаем прямую задачу на адаптивной сетке с выбранным критерием дробления ячейки (рисунок 5.27 сверху);

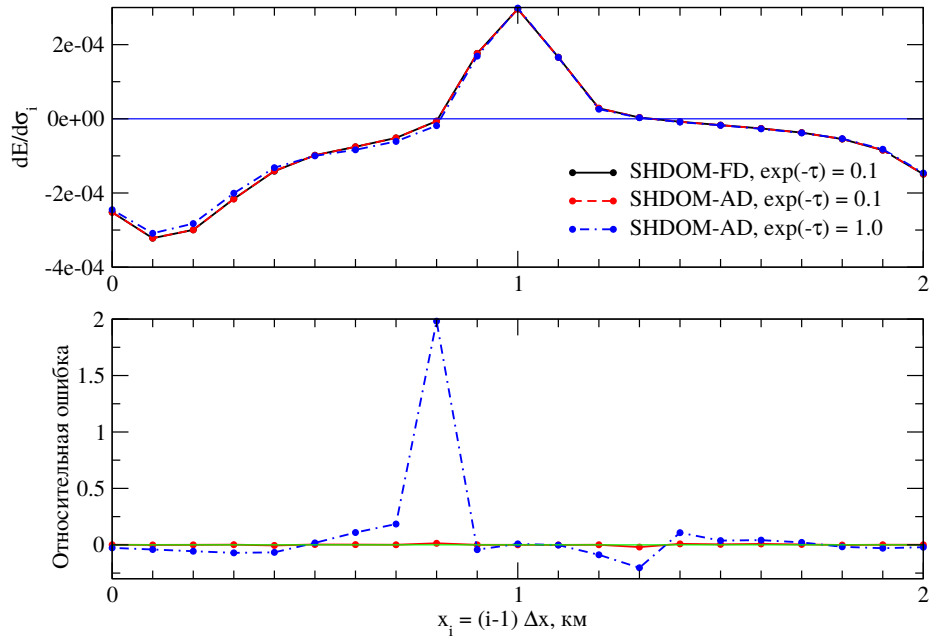


Рисунок 5.26 — Точность линейаризованного SHDOM с аналитическим дифференцированием (AD) относительно SHDOM с конечными разностями (FD). $\sigma_{\max} = 4.0 \text{ км}^{-1}$, $N_{\mu} = 32$, $\theta_m = 0^\circ$, $K_a = 1.0$.

2. решаем сопряженную задачу, при этом используем адаптивную сетку из прямой задачи в качестве базисной и строим новую адаптивную сетку, используя тот же критерий дробления ячейки или меньше (рисунок 5.27 посередине);
3. интерполируем поле яркости прямой задачи на более мелкую сетку сопряженной задачи, чтобы рассчитать скалярное произведение в (5.67).

Во втором случае

1. выполняем дробление основной сетки вдоль границ сопряженного падающего пучка;
2. решаем прямую задачу на полученной адаптивной сетке (рисунок 5.27 снизу);
3. решаем сопряженную задачу на адаптивной сетке из прямой задачи без дополнительного дробления.

В последнем случае и прямая, и сопряженная задачи решаются на одной и той же сетке, и необходимость в дополнительной интерполяции отпадает. Изначальное дробление сетки контролируется параметром N_{div} — числом субъячеек, на которое делится ячейка базовой сетки, которую пересекает граница сопряженного падающего потока. Далее используется критерий дробления 10^{-3} .

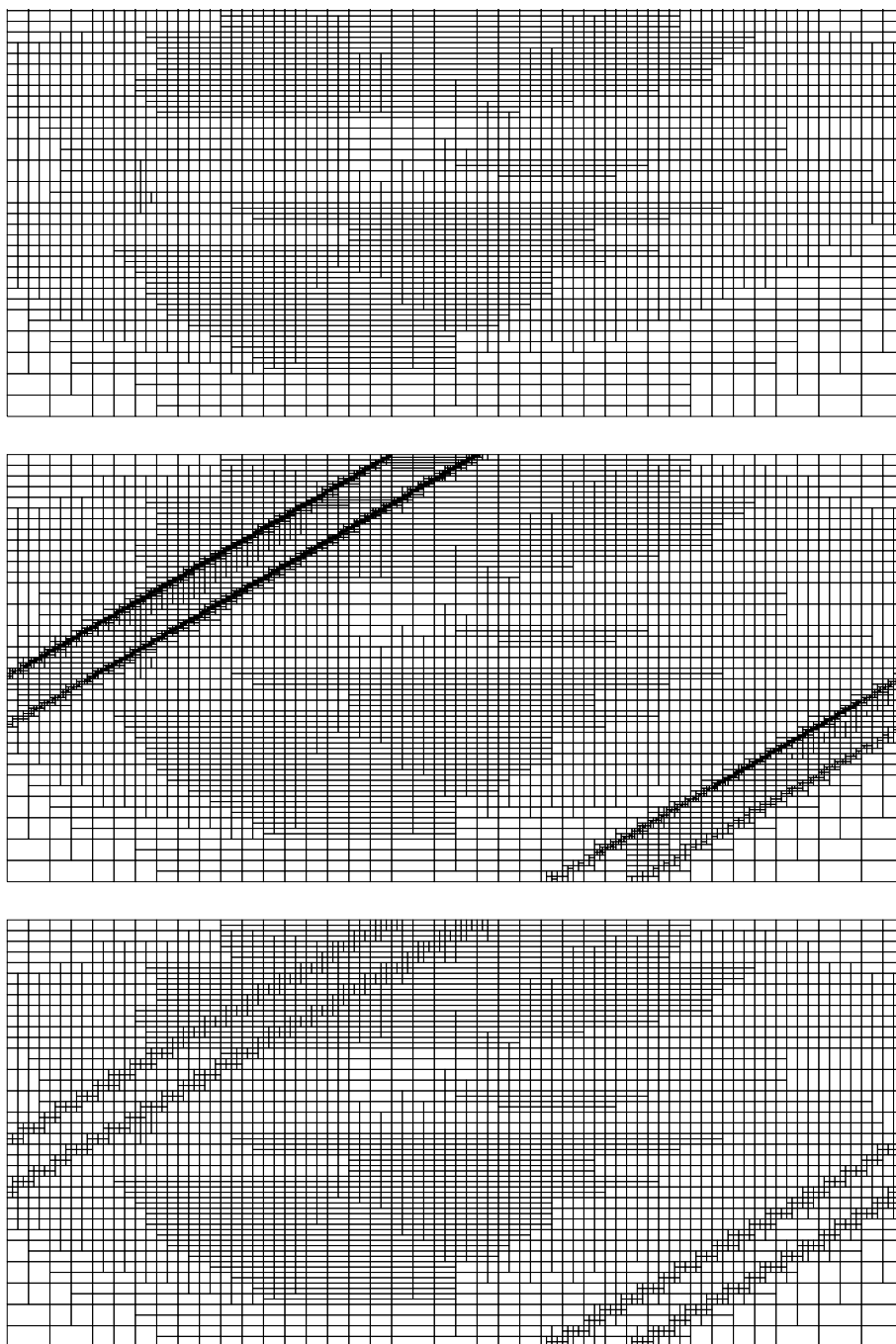


Рисунок 5.27 — Адаптивные сетки, соответствующие критерию дробления 10^{-3} , $\sigma_{\max} = 4.0 \text{ км}^{-1}$, $N_{\text{div}} = 6$, $\theta_{\text{м}} = 60^\circ$, $K_a = 1.0$.

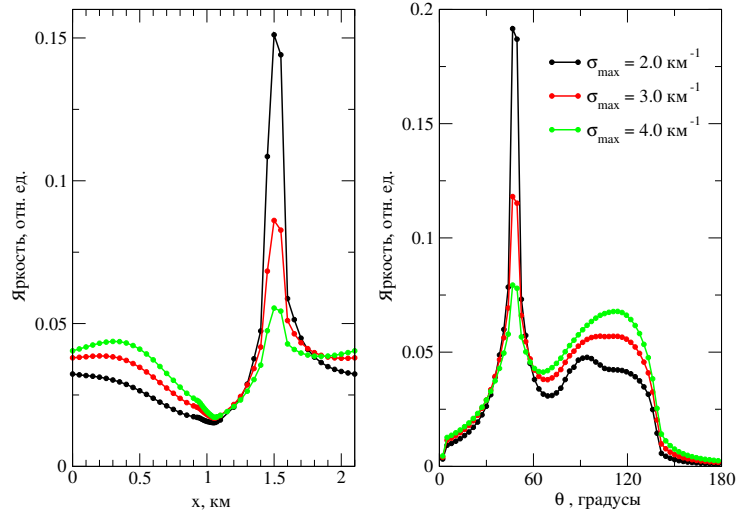


Рисунок 5.28 — Решения сопряженной задачи $\hat{I}_d^{\dagger}(x, z = 0 \text{ км}, -\Omega_0)$ (слева) и $\hat{I}_d^{\dagger}(x = 0.5 \text{ км}, z = 0.5 \text{ км}, \theta, \varphi = 0)$ (справа), рассчитанные с помощью SHDOM-DDB при разных значениях σ_{\max} . $N_{\mu} = 64$, $N_{\text{div}} = 6$, $\theta_{\text{м}} = 0^\circ$, $K_a = 0.5$.

Трудности, связанные с решением сопряженной задачи, иллюстрируются рисунками 5.28 и 5.29. На рисунке 5.28 показаны пространственное и угловое распределения яркости в сопряженной задаче. Они имеют резкие максимумы. Причем, чем меньше σ_{\max} , тем более резкий максимум. На рисунке 5.29 показан лучевой эффект: в угловых распределениях могут появиться пики, положение которых зависит от N_{μ} .

Далее проанализируем влияние пространственного разрешения вдоль границы сопряженного падающего потока, определяемого параметром N_{div} , а также влияние длины интервала усреднения, определяемого параметром K_a , на точность линеаризованных SHDOM и SHDOM-DDB. Для обоих методов используются предположения (5.74) и (5.77).

5.7.2.1 Пространственное разрешение

Влияние пространственного разрешения на точность линеаризованных SHDOM и SHDOM-DDB показано на рисунке 5.30, из которого следует что относительная ошибка уменьшается с ростом дискретизации вдоль границы потока; относительная ошибка E меньше, чем относительная ошибка $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$; SHDOM-DDB более точный, чем SHDOM.

5.7.2.2 Длина интервала усреднения

В таблице 5.4 показаны относительные ошибки для $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$, усредненные по x_i , для SHDOM и SHDOM-DDB. Результаты получены при различных значениях параметра K_a и зенитного угла визирования $\theta_{\text{м}}$. Относительная ошибка уменьшается с ростом пространствен-

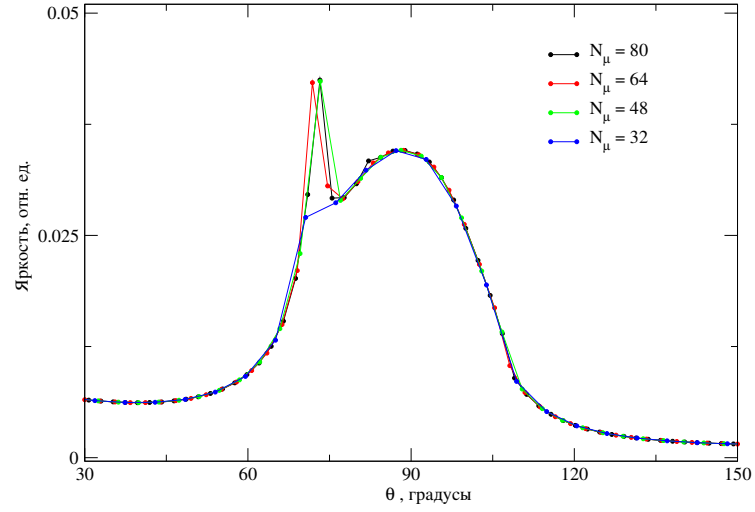


Рисунок 5.29 — Сопряженное решение $\hat{I}_d^\dagger(x = 0.5 \text{ км}, z = 0.5 \text{ км}, \theta, \varphi = 0)$, рассчитанное с помощью SHDOM-DDB при разных значениях N_μ . $\sigma_{\max} = 4.0 \text{ км}^{-1}$, $N_{\text{div}} = 6$, $\theta_m = 0^\circ$, $K_a = 1.0$.

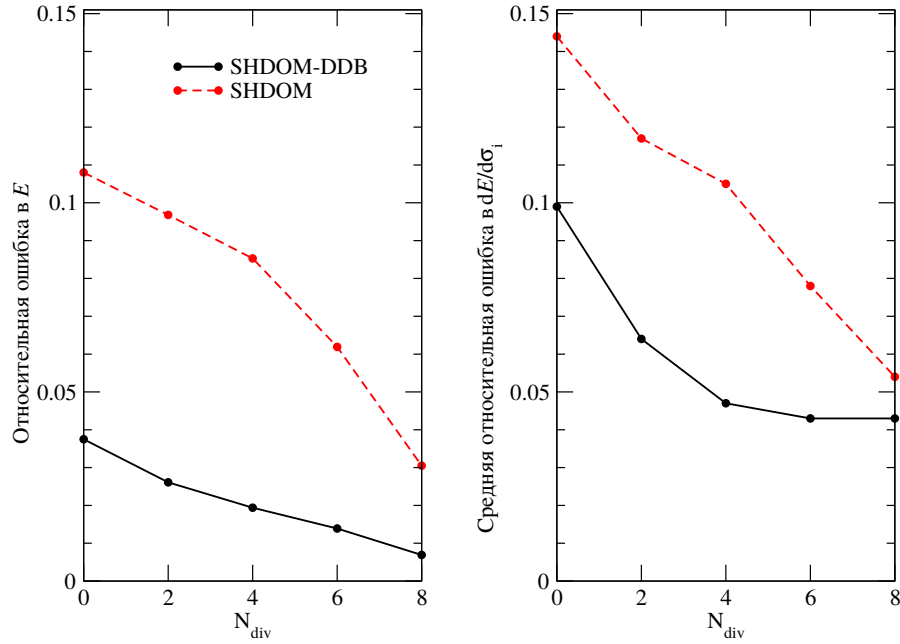


Рисунок 5.30 — Относительная ошибка E (слева) и средняя относительная ошибка $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$ (справа) для SHDOM и SHDOM-DDB. Рассмотрено несколько пространственных разрешений: $N_{\text{div}} = 0$ (6986 ячеек), $N_{\text{div}} = 2$ (7036 ячеек), $N_{\text{div}} = 4$ (7334 ячеек), $N_{\text{div}} = 6$ (8438 ячеек), $N_{\text{div}} = 8$ (10764 ячеек). $\sigma_{\max} = 4.0 \text{ км}^{-1}$, $N_\mu = 64$, $\theta_m = 45^\circ$, $K_a = 1.0$.

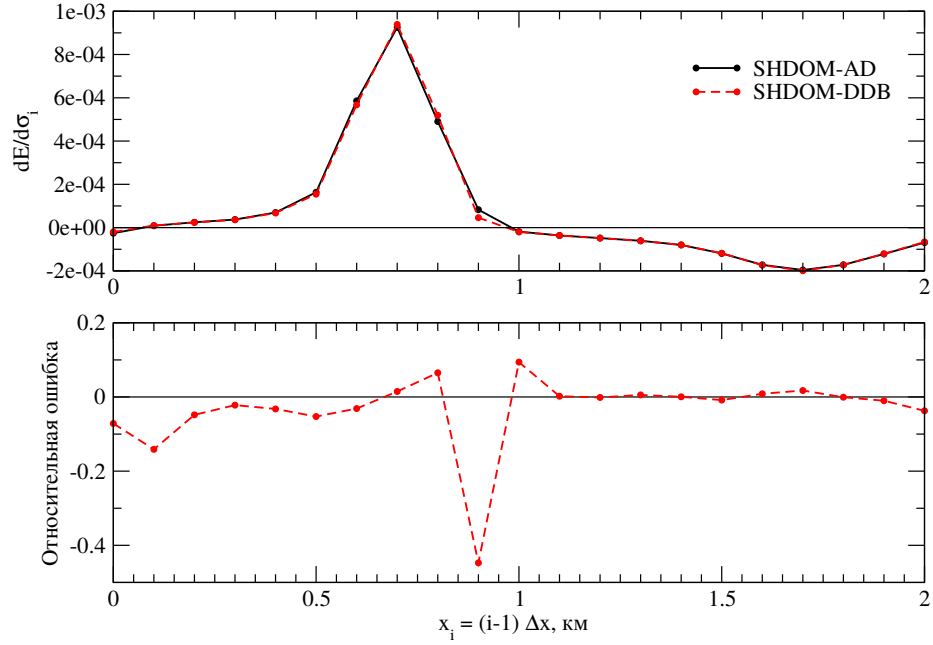


Рисунок 5.31 — Производные $\partial E/\partial \sigma_{\text{ext}}^i$ и относительные ошибки $\partial E/\partial \sigma_{\text{ext}}^i$ при $\sigma_{\text{max}} = 4.0 \text{ км}^{-1}$, $N_\mu = 64$, $N_{\text{div}} = 6$, $\theta_m = 30^\circ$, и $K_a = 1.0$.

ного разрешения. SHDOM-DDB точнее SHDOM при $\theta_m = 0^\circ$, и $\theta_m = 45^\circ$, хотя при $\theta_m = 15^\circ$, $\theta_m = 30^\circ$, и $\theta_m = 60^\circ$, методы сравнимы по точности. Максимальные относительные ошибки получены при минимальной длине интервала усреднения, т.е. при $K_a = 1.0$. На точность не влияет число дискретных ординат. Таким образом, можно сделать вывод, что лучевой эффект не играет существенной роли при расчете производных.

Наибольшая ошибка SHDOM-DDB равна 0.06 при $K_a = 1.0$ и $\theta_m = 30^\circ$. На рисунке 5.31 показаны $\partial E/\partial \sigma_{\text{ext}}^i$ и относительная ошибка. В отличие от I , значения производных могут быть как положительными, так и отрицательными. Наибольшие относительные ошибки производных соответствуют их наименьшим значениям. С ростом интервала усреднения производная как функция x становится всё более гладкой функцией, а области малых значений производной становятся меньше.

В таблице 5.5 приведены относительные ошибки $\partial E/\partial \sigma_{\text{ext}}^i$ при некоторых значениях σ_{max} . Приведенные результаты показывают, что точность вычисления производных увеличивается с ростом оптической толщины среды.

Для $\sigma_{\text{max}} = 4.0 \text{ км}^{-1}$, $N_\mu = 32$, $\theta_m = 0^\circ$, $K_a = 1.0$ время счета для SHDOM-AD составляет 25 минут, для SHDOM-DDB – 8 минут, для сопряженного SHDOM – 2 минуты. SHDOM-AD использует 6986 ячеек ($N_{\text{div}} = 0$), а SHDOM-DDB и сопряженный SHDOM 8438 ячеек ($N_{\text{div}} = 6$).

Таблица 5.4 — Средняя относительная ошибка $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$, выраженная в процентах, для SHDOM и SHDOM-DDB при $N_\mu = 64$, $N_{\text{div}} = 6$ (сверху), $N_\mu = 32$, $N_{\text{div}} = 6$ (посередине), и $N_\mu = 64$, $N_{\text{div}} = 0$ (снизу). $\sigma_{\text{max}} = 4.0 \text{ км}^{-1}$.

K_a	SHDOM					SHDOM-DDB				
	θ_m					θ_m				
	0°	15°	30°	45°	60°	0°	15°	30°	45°	60°
5	1.7	3.2	2.8	3.0	1.0	1.9	3.2	2.9	2.2	1.0
4	1.9	2.2	2.5	2.6	1.6	1.5	2	2.5	2.0	1.7
3	2.4	3.3	3.1	3.0	1.2	1.5	3.3	3.1	2.3	1.2
2	2.8	2.8	2.7	3.7	2.8	1.4	2.8	2.7	2.4	3.0
1	5.2	4.4	6.0	7.8	2.3	2.4	4.4	6.0	4.3	2.3

K_a	SHDOM					SHDOM-DDB				
	θ_m					θ_m				
	0°	15°	30°	45°	60°	0°	15°	30°	45°	60°
5	1.7	3.2	2.7	3.0	1.0	1.9	3.2	2.8	2.2	1.0
4	1.9	2.2	2.5	2.6	1.7	1.5	2.2	2.5	2.0	1.7
3	2.4	3.3	3.0	3.0	1.2	1.5	3.3	3.1	2.3	1.3
2	2.8	2.8	2.6	3.8	2.6	1.4	2.8	2.7	2.4	2.8
1	5.2	4.3	5.9	7.8	2.4	2.5	4.3	6.0	4.3	2.4

K_a	SHDOM					SHDOM-DDB				
	θ_m					θ_m				
	0°	15°	30°	45°	60°	0°	15°	30°	45°	60°
5	3.5	3.4	6.0	3.7	1.1	2.0	3.4	6.1	2.1	1.0
4	3.0	2.3	2.6	3.4	1.0	1.8	2.3	2.7	2.3	1.4
3	4.2	3.4	3.1	4.2	1.0	1.8	3.5	3.2	3.1	1.0
2	6.5	3.2	2.8	7.9	1.4	1.7	3.1	2.7	4.7	2.4
1	15.1	6.0	5.0	14.5	2.4	2.3	4.5	5.6	9.9	2.6

Таблица 5.5 — Относительная ошибка $\partial E / \partial \sigma_{\text{ext}}^i$ в процентах для SHDOM и SHDOM-DDB при $N_\mu = 32$, $N_{\text{div}} = 6$, $K_a = 1.0$.

σ_{max}	SHDOM					SHDOM-DDB				
	θ_m					θ_m				
	0°	15°	30°	45°	60°	0°	15°	30°	45°	60°
2.0	8.7	8.0	6.8	8.4	8.4	7.7	8.0	6.8	7.0	8.4
4.0	5.2	4.3	5.9	7.8	2.4	2.5	4.3	6.0	4.3	2.4
6.0	5.7	3.0	4.1	6.7	1.4	2.3	3.0	4.0	2.3	1.3

Результаты Главы 5

1. Была рассмотрена многомерная модель на примере метода коротких характеристик. Рассмотрены различные схемы интерполяции интенсивности в расчетной ячейке. Показано, что ошибка в линейных схемах с адаптивной сеткой сопоставима с ошибкой схем высокого порядка с регулярной сеткой.
2. В расчетный код SHDOM, позволяющий решать уравнение переноса в трехмерной геометрии, включена поляризация. Такое обобщение выполнено на основе комплексных и действительных обобщенных сферических гармоник. Для вычислительной эффективности созданный код VSHDOM использует представления вектора Стокса и функции источников с помощью дискретных ординат и обобщенных сферических гармоник, а также метод коротких характеристик для расчета параметров Стокса в узлах решетки.
3. Адаптивная сетка позволяет значительно повысить точность расчета для I , и незначительно для Q . Объяснение заключается в том, что в рассмотренных сценариях компонента Q много меньше компоненты I , а в текущей версии критерий дробления ячейки при построении адаптивной сетки включает весь вектор Стокса. Поэтому, если требуется рассчитать Q с высокой точностью, критерий дробления надо формулировать относительно Q , а не вектора Стокса.
4. Линеаризованный SHDOM с помощью аналитического дифференцирования является очень точным методом. Его следует использовать в сочетании с методом длинных характеристик. В случае использования метода коротких характеристик производные рассчитываются неточно. Метод требует значительных ресурсов по времени и по используемой памяти, так как для каждого узла расчетной сетки требуется хранить не только

коэффициенты разложения функции источников, но и её производные по интересующим параметрам.

5. Линеаризованные SHDOM и SHDOM-DDB с помощью сопряженных уравнений требуют меньше памяти и более быстрые, чем SHDOM-AD. Самым быстрым является сопряженный SHDOM, более точным является SHDOM-DDB. Точность этих методов увеличивается с ростом оптической толщины среды, пространственного разрешения вдоль границ сопряженного падающего потока и длины интервала усреднения. Число дискретных ординат влияет несильно на точность расчета производных.

ГЛАВА 6. Применение разработанных алгоритмов для решения реальных задач дистанционного зондирования

6.1 Решение нелинейных обратных задач

6.1.1 Интегральная и дифференциальная модели

Обратные задачи атмосферной оптики, как правило, являются нелинейными. Рассмотрим нелинейное уравнение:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{y}, \quad (6.1)$$

в котором за \mathbf{x} будем считать входные параметры прямой модели \mathbf{F} , а за \mathbf{y} – выходные параметры. В общем случае, по известным измерениям $\mathbf{y}^\delta = \mathbf{y} + \delta$, где δ – вектор шумов, и прямой модели \mathbf{F} требуется найти вектор \mathbf{x} .

Восстановление параметров облака производится в так называемой интегральной модели, в которой

$$\ln R_{\text{meas}}(\lambda) \approx \ln R_{\text{sim}}(\lambda, \mathbf{x}), \quad (6.2)$$

где $R_{\text{meas}}(\lambda)$ – измеренный спектр, а $R_{\text{sim}}(\lambda, \mathbf{x})$ – рассчитанный спектр при векторе исходных данных \mathbf{x} . Восстановление газовых профилей производится в дифференциальной модели (по аналогии с DOAS¹):

$$\ln \bar{R}_{\text{meas}}(\lambda) \approx \ln \bar{R}_{\text{sim}}(\lambda, \mathbf{x}), \quad (6.3)$$

где

$$\ln \bar{R}_{\text{sim}}(\lambda, \mathbf{x}) = \ln R_{\text{sim}}(\lambda, \mathbf{x}) - P_{\text{sim}}(\lambda, \mathbf{p}_{\text{sim}}(\mathbf{x})),$$

$$\ln \bar{R}_{\text{meas}}(\lambda) = \ln R_{\text{meas}}(\lambda) - P_{\text{meas}}(\lambda, \mathbf{p}_{\text{meas}}),$$

¹Однако модель DOAS не эквивалентна дифференциальной модели, используемой в диссертации, так как в DOAS-модели делается предположение о том, что дифференциальная структура спектра линейно зависит от параметров атмосферы. Это допущение существенно упрощает расчет. В дифференциальной модели таких допущений не делается и используется полная модель переноса излучения.

а P_{sim} и P_{meas} – полиномы малой степени с коэффициентами \mathbf{p}_{sim} и \mathbf{p}_{meas} , соответственно. Последние определяются как

$$\mathbf{p}_{\text{sim}}(\mathbf{x}) = \arg \min_{\mathbf{p}} \|\log R_{\text{sim}}(\cdot, \mathbf{x}) - P_{\text{sim}}(\cdot, \mathbf{p})\|^2,$$

$$\mathbf{p}_{\text{meas}} = \arg \min_{\mathbf{p}} \|\log R_{\text{meas}}(\cdot) - P_{\text{meas}}(\cdot, \mathbf{p})\|^2.$$

Предполагается, что гладкие функции \mathbf{p}_{sim} и \mathbf{p}_{meas} содержат информацию о процессах рассеяния в облаке или аэрозоле, а также об отражении от поверхности, которые формируют фон (гладкую компоненту) спектра. Тогда $\ln \bar{R}$ содержит информацию о процессах поглощения, формирующих пики в спектре [133]. Интегральная модель более физическая, так как в ней моделируются процессы рассеяния в облаке и аэрозольном слое.

Так как уравнения (6.2) и (6.3) являются нелинейными и плохо обусловленными, для нахождения \mathbf{x} необходима процедура регуляризации. Регуляризация по Тихонову означает нахождение \mathbf{x} в ходе минимизации функционала (функции Тихонова)

$$\arg \min_{\mathbf{x}} \mathcal{F}(\mathbf{x}), \quad (6.4)$$

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} [\|\mathbf{y}^\delta - \mathbf{F}(\mathbf{x})\|^2 + \alpha \|\mathbf{L}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a)\|^2], \quad (6.5)$$

где $\mathbf{y}^\delta = [\ln R_{\text{meas}}(\lambda_i)]_{i=1,m}$, $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = [\ln R_{\text{sim}}(\lambda_i, \mathbf{x})]_{i=1,n}$, \mathbf{L} – регуляризационная матрица и α – параметр регуляризации. Принципы построения регуляризационной матрицы приведены в Приложении Д. Минимизация функции Тихонова сводится к методу наименьших квадратов:

$$\min_{\mathbf{x}} \mathcal{F}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{f}(\mathbf{x})\|^2, \quad (6.6)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{y}^\delta \\ \sqrt{\alpha} \mathbf{L}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_a) \end{bmatrix}.$$

Методы нелинейной оптимизации для задачи (6.6) можно разделить условно на три группы

1. методы локально оптимизации (градиентные методы), которые используют первые и вторые производные от прямой модели;

2. методы глобальной оптимизации (методы прямого поиска), которым не требуются производные;
3. метод подбора (фиттинга), которым также не требуются производные, но у которых нет четкой стратегии поиска.

Далее мы рассмотрим эти методы.

6.1.2 Методы локальной оптимизации

Градиентные методы основаны на том, что исходная функция заменяется на линейную или квадратичную функцию в окрестности решения \mathbf{x}_k на текущей итерации k [120]:

$$\mathcal{M}_k(\mathbf{p}) = \mathcal{F}(\mathbf{x}_k) + \mathbf{g}(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{G}(\mathbf{x}_k) \mathbf{p}. \quad (6.7)$$

Здесь \mathbf{g} и \mathbf{G} – градиент и гессиан \mathcal{F} , соответственно. Тогда $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}_f(\mathbf{x})^T \mathbf{f}(\mathbf{x})$ и $\mathbf{G}(\mathbf{x}) = \mathbf{K}_f(\mathbf{x})^T \mathbf{K}_f(\mathbf{x}) + \mathbf{Q}(\mathbf{x})$, где

$$\mathbf{K}_f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \mathbf{K}(\mathbf{x}) \\ \sqrt{\alpha} \mathbf{L} \end{bmatrix}$$

– матрица Якоби от $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, $\mathbf{Q}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m [\mathbf{f}(\mathbf{x})]_i \mathbf{G}_i(\mathbf{x})$, \mathbf{G}_i – гессиан от $[\mathbf{f}]_i$. На k -той итерации наша задача найти такое следующее приближение $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \tau_k \mathbf{p}_k$, что $\mathcal{F}(\mathbf{x}_k + \tau_k \mathbf{p}_k) < \mathcal{F}(\mathbf{x}_k)$, где \mathbf{p}_k – направление поиска, а τ_k – неотрицательный скаляр. В методе Гаусса-Ньютона предполагается, что

$$\mathbf{K}_f(\mathbf{x})^T \mathbf{K}_f(\mathbf{x}) \gg \mathbf{Q}(\mathbf{x}) \quad (6.8)$$

, что дает возможность оценить гессиан как $\mathbf{G}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{K}_f(\mathbf{x})^T \mathbf{K}_f(\mathbf{x})$. На практике это предположение работает в тех случаях, когда невязка $\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^*)\|$ сопоставима с наибольшим собственным значением $\mathbf{K}_f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{K}_f(\mathbf{x}^*)$. Тогда \mathbf{p} находится из уравнения

$$\mathbf{K}_f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{K}_f(\mathbf{x}_k) \mathbf{p} = -\mathbf{K}_f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{f}(\mathbf{x}_k). \quad (6.9)$$

Откуда

$$(\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L}) \mathbf{x} = \mathbf{K}^T (\mathbf{y}^\delta - \mathbf{F}(\mathbf{x})), \quad (6.10)$$

и

$$\mathbf{x} = \mathbf{K}^\dagger (\mathbf{y}^\delta - \mathbf{F}(\mathbf{x})), \quad (6.11)$$

$$\mathbf{K}^\dagger = (\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L})^{-1} \mathbf{K}^T. \quad (6.12)$$

Пусть размерности матриц K и L равны соответственно $m \times n$ и $p \times n$. Чтобы избежать обращения матриц с большим числом обусловленности, используется обобщенное сингулярное разложение (generalized singular value decomposition (GSVD)) для пары матриц (\mathbf{K}, \mathbf{L}) [362]:

$$\mathbf{K} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma}_1 \mathbf{W}^{-1}, \quad (6.13)$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{V} \mathbf{\Sigma}_2 \mathbf{W}^{-1}, \quad (6.14)$$

где

$$\mathbf{\Sigma}_1 = \begin{bmatrix} \text{diag}(\sigma_i)_{p \times p} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E}_{n-p} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{\Sigma}_2 = \begin{bmatrix} \text{diag}(\mu_i)_{p \times p} & \mathbf{0} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m], \quad \mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m], \quad \mathbf{W} = [\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_n],$$

$$\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{U}^T = \mathbf{E}_m, \quad \mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{E}_p.$$

Тогда (6.12) допускает следующую факторизацию:

$$\mathbf{K}^\dagger = (\mathbf{K}^T \mathbf{K} + \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L})^{-1} \mathbf{K}^T = \mathbf{W} \mathbf{\Sigma} \mathbf{U}^T, \quad (6.15)$$

где

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{bmatrix} \text{diag}\left(\frac{\gamma_i^2}{(\gamma_i^2 + \alpha) \sigma_i}\right)_{p \times p} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E}_{n-p} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \gamma_i = \frac{\sigma_i}{\mu_i}.$$

Окончательно регуляризованное решение на текущей итерации имеет вид:

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^p \frac{\gamma_i^2}{(\gamma_i^2 + \alpha) \sigma_i} (\mathbf{u}_i^T \mathbf{y}^\delta) \mathbf{w}_i + \sum_{i=p+1}^n (\mathbf{u}_i^T \mathbf{y}^\delta) \mathbf{w}_i. \quad (6.16)$$

Если значение невязки $\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^*)\|$ много больше чем наименьшее собственное значение матрицы $\mathbf{K}_f(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{K}_f(\mathbf{x}^*)$, условие (6.8) не выполняется. В этом случае в (6.9) необходимо

учесть \mathbf{Q} хотя бы приближенно:

$$[\mathbf{K}_f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{K}_f(\mathbf{x}_k) + \bar{\mathbf{Q}}(\mathbf{x}_k)] \mathbf{p} = -\mathbf{K}_f(\mathbf{x}_k)^T \mathbf{f}(\mathbf{x}_k). \quad (6.17)$$

где $\bar{\mathbf{Q}}$ – аппроксимация \mathbf{Q} . Методы, использующие (6.17) называются квази-ньютоновскими методами. Они пытаются оценить \mathbf{Q} , исходя из поведения целевой функции и её градиента. В алгоритме Алгоритм Бройдена – Флетчера – Гольдфарба – Шанно (BFGS) (англ. Broyden – Fletcher – Goldfarb – Shanno algorithm) используется схема

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{Q}}(\mathbf{x}_{k+1}) = & \bar{\mathbf{Q}}(\mathbf{x}_k) - \frac{1}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{W}(\mathbf{x}_k) \mathbf{s}_k} \mathbf{W}(\mathbf{x}_k) \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T \mathbf{W}(\mathbf{x}_k) \\ & + \frac{1}{\mathbf{h}_k^T \mathbf{s}_k} \mathbf{h}_k \mathbf{h}_k^T, \end{aligned} \quad (6.18)$$

где $\mathbf{s}_k = \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k$, $\mathbf{h}_k = \mathbf{g}(\mathbf{x}_{k+1}) - \mathbf{g}(\mathbf{x}_k)$ и $\mathbf{W}(\mathbf{x}_k) = \mathbf{K}_f(\mathbf{x}_{k+1})^T \mathbf{K}_f(\mathbf{x}_{k+1}) + \bar{\mathbf{Q}}(\mathbf{x}_k)$. В диссертации используется модификация BFGS метода – L-BFGS метод (limited memory BFGS) – предложенный в [363]. В этом алгоритме в памяти хранятся только несколько векторов для описания обратного гессиана, что приводит к вычислительной эффективности алгоритма.

Отметим, что градиентные методы могут найти только локальный минимум, который необязательно будет решением задачи глобальной оптимизации. Найденный локальный минимум зависит от начального приближения. Для задач с несколькими локальными минимумами используются итерационные алгоритмы локального поиска (Iterated Local Search – ILS) [364]. Пусть при начальном приближении \mathbf{x}_0 мы находим локальный минимум \mathbf{x}^* . Далее выбираются две точки $\mathbf{x}_{+0} = \mathbf{x}^* + \mathbf{p}$ и $\mathbf{x}_{-0} = \mathbf{x}^* - \mathbf{p}$ в качестве новых начальных приближений и находятся новые локальные минимумы \mathbf{x}_+^* и \mathbf{x}_-^* . Для $\mathbf{x} = \arg \min\{\mathcal{F}(\mathbf{x}^*), \mathcal{F}(\mathbf{x}_+^*), \mathcal{F}(\mathbf{x}_-^*)\}$ возможны два варианта: (1) если $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, то алгоритм завершается; (2) если $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$, то выбираются новые две точки, отстоящие от \mathbf{x} на \mathbf{p} и выполняется новая итерация. Величина \mathbf{p} определяется эмпирическим путем для конкретной задачи.

6.1.3 Методы глобальной оптимизации (методы прямого поиска)

Методы прямого поиска сходятся менее быстро, чем градиентные методы, но более устойчивы в тех случаях, когда присутствует значительный шум в измерениях. В последующих расчетах будут рассмотрены два метода:

1. Генетические алгоритмы (GA) относятся к категории т.н. эволюционных алгоритмов [365–367]. Эволюционный алгоритм использует механизмы, которые присущи биоло-

гической эволюции, а различные решения задачи оптимизации играют роль особей в популяции. Генетический алгоритм ищет решение в виде последовательности двоичных цифр. Чтобы создать следующее поколение от нынешней популяции, используются три основных правила на каждой итерации: правило (I) отбора, по которому выбираются особи-родители; (II) правило кроссовера, которое сочетает две особи для рождения особей следующего поколения; и (III) правило мутации, которое вносит случайные изменения в некоторые особи родителей. В отличие от градиентных методов, генетические алгоритмы ищут не одно, а несколько приближений за одну итерацию, с использованием генератора случайных чисел.

2. Алгоритм имитации отжига построен на модели остывания кристалла, который достигает минимума потенциальной энергии, когда атомы выстраиваются в идеальную кристаллическую решетку [368–370]. При этом, медленное «охлаждение» системы приводит к снижению вероятности выбора менее оптимального решения. Возможность выбора менее оптимального решения принципиально отличает этот метод от уже рассмотренных. На каждой итерации алгоритм случайным образом создает нового кандидата в некой окрестности текущего решения. Далее с некоторой вероятностью, зависящей от температуры, текущее решение меняется на кандидата.

К категории методов прямого поиска можно условно отнести метод подбора, в котором нет строгих критериев для выбора вектора состояния для следующей итерации. В этом случае вектор состояния выбирается интуитивно. Сильная сторона метода заключается в его устойчивости. Он применим к обратным задачам с произвольным числом неизвестных. Однако ручной подбор параметров на практике неприменим в задачах с большим объемом данных.

6.2 Использование одномерной модели переноса излучения для интерпретации измерений GOME 2

В этой части мы рассмотрим применение ускоренного радиационного кода LMDOM для обработки данных GOME-2, полученных за июль 2015 года, с помощью кода LMDOM. Расчетный код LMDOM основан на малоугловой модификации метода сферических гармоник (код SAM), аналитически линеаризован и включает все техники ускорения, описанные в Главе 2 и Главе 3. Расчеты производились на системе Intel Xeon CPU E5-1620 3.60GHz с видеокартой Tesla K20. Операционная система openSUSE 13.1.

Прежде всего, оценим эффективность предложенных в диссертации методик. Для этого расчеты выполнялись на основе классического метода дискретных ординат с одним из методов. Коэффициент ускорения определялся как отношение времен счета без метода ускорения и с ним. Соответствующие коэффициенты ускорения k_i показаны в таблице 6.1. Следует отметить, что коэффициент ускорения каждого метода сильно зависит от рассматриваемого сценария (от степени «вытянутости» индикатрис, углов зондирования и т.д.). Поэтому в таблице 6.1 указан диапазон значений k_i . Исходные данные построены с помощью метода «умной выборки», описанной в разделе 6.3.3 и покрывают диапазон: высота поверхности (0-8 км), общее содержание O_3 (250-550 DU), альbedo поверхности (0-1), параметр облачности (0-1), оптическая толщина облака (0-100), положение верхней границы облака (5-20 км), угол зондирования (0-88), угол зондирования (0-88), относительный азимутальный угол (0-180). Используются аэрозольные модели из базы OPAC [39] (Continental clean, continental average, continental polluted, urban, desert, maritime clean, maritime polluted, maritime tropical), профили озона из базы TOMS v.7. Если пренебречь кумулятивными и «антикумулятивными» эффектами, то коэффициент ускорения всего алгоритма рассчитывается как $k^{\text{total}} = \prod k_i$. В среднем по всем рассматриваемым сценариям $k^{\text{total}} \approx 500$. Однако методы ускорения влияют друг на друга (например, чем эффективнее ядро алгоритма из-за малоугловой модификации, то тем меньше выигрыш от снижения размерности исходных данных). Фактический коэффициент ускорения $k^{\text{total}} \approx 280$. Отметим, что все методы кроме метода № 4 не вносят дополнительную ошибку в расчет. Относительная разница в общем определении озона не превышает 0.1%.

На рисунках 6.1, 6.2 и 6.3 показаны результаты обработки данных GOME 2 на 11 мая 2015 г., 29 мая 2015 г. и 15 июня 2015 г., соответственно. Решение обратной задачи проводилось в рамках дифференциальной модели, соответствующей уравнению (6.3). Относительное расхождение между предложенным алгоритмом и алгоритмом GDP 4.0 [46] не превышает 0.5%. В обоих случаях для определения профиля озона использовалась климатологическая база TOMS по методике, описанной в части 1.5.1. Учет поляризации и неупругого рассеяния осуществлялся согласно соотношению (1.26). Отличия в общем содержании озона, по-видимому, обусловлены некоторыми отличиями в регуляризации решения. Отметим, что ранее операционный алгоритм GDP был проверен на основе сравнения с наземными наблюдениями. Полученное расхождение не превышало 1 % (в среднем не более 0.5 %). Результаты валидации опубликованы в [371]. Таким образом, представленный в диссертации алгоритм был апробирован на основе данных GOME-2 по общему определению озона. При этом, развитые в

Таблица 6.1 — Реализованные в коде LMDOM техники ускорения и коэффициенты ускорения k_i

i	Метод ускорения	Коэффициент ускорения k_i
1	Малоугловая модификация	1.4 — 3.8
2	Оптимизация по параметру облачности	1.8 — 2.0
3	Преобразование Вотермана	1.1 — 1.4
4	Снижение размерности исходных данных	8.0 — 12.7
5	Распараллеливание на GPU	12.0 — 16.1
6	Оптимизация метода ложной ординаты	1.1 — 1.2
7	Телескопический метод	1.2 — 1.7
Теоретический коэффициент ускорения алгоритма		500
Фактический коэффициент ускорения алгоритма		280

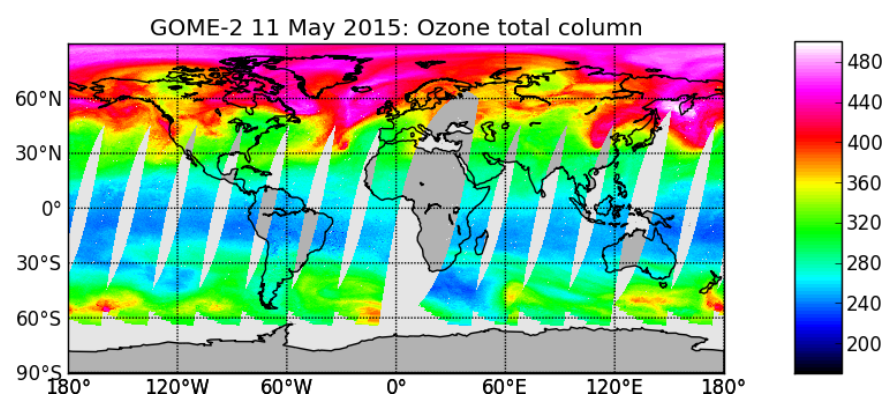


Рисунок 6.1 — Результат обработки данных GOME-2 на 11.05.2015

диссертации методы ускорения интерпретации сигнала приводят к ускорению 280 раз без потери с точности расчета.

6.3 Регрессионные модели для определения высоты вулканических шлейфов

В связи с необходимостью обработки больших объемов данных дистанционного зондирования, получаемых со спутников, активно разрабатываются и внедряются методы машинного обучения. Как правило, методы машинного обучения (регрессионный анализ и искусственные нейронные сети) используются совместно с методами снижения размерности. Так, например, М.Ю. Катаевым и А.К. Лукъяновым [372] метод снижения размерности и регрессионный анализ применен для определения концентрации CO₂ по данным GOSAT. Тимофеев и др. [373] предложили использовать снижение размерности для процедуры параметризации показателя поглощения аэрозоля при решении обратной задачи. Снижение размерности спектральных

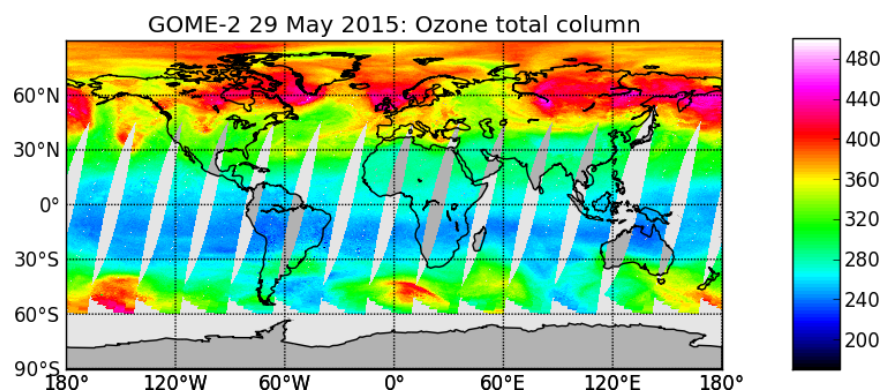


Рисунок 6.2 — Результат обработки данных GOME-2 на 29.05.2015

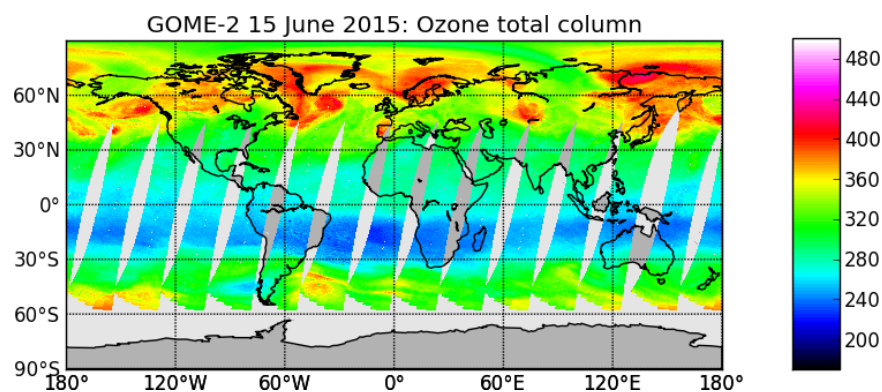


Рисунок 6.3 — Результат обработки данных GOME-2 на 15.06.2015

данных используется для ускорения радиационных кодов, использующих line-by-line вычисления. Например, в [264, 265] координаты PCS рассчитываются как линейная комбинация значений яркости в некоторых спектральных точках. Такой подход ускоряет line-by-line модель на два порядка. Что же касается обратных задач, когда исходные спектральные данные $\{\mathbf{r}_i\}_{i=1}^S$ описываются меньшим числом параметров, мы получаем более простую и устойчивую модель, для которой проще решить обратную задачу. В [374] метод главных компонент используется для определения общего содержания SO_2 . Сначала по спектрам, измеренным над экваториальной областью Тихого океана (где количество SO_2 очень мало), определяется набор ортогональных эмпирических функций \mathbf{F} . Набор базисных векторов \mathbf{F} добавляется вектором \mathbf{f}' , отвечающим за SO_2 (он рассчитывается с помощью линейаризованной модели типа LIDORT). Далее спектры для областей с SO_2 описываются в расширенном базисе $\{\mathbf{F}, \mathbf{f}'\}$. Координата вдоль \mathbf{f}' пропорциональна общему содержанию SO_2^2 . По утверждению авторов рабо-

²Иными словами, обратная задача решается в два шага. На первом шаге определяется система эмпирических ортогональных функций для спектров, измеренных над областями без SO_2 . На втором шаге делается допущение о том, что невязка между спектром, содержащим SO_2 , и этим же спектром, но воспроизведенным с помощью полученной системы ортогональных функций, пропорциональна общему содержанию SO_2 , откуда и находится искомая концентрация.

ты [374], такой метод позволяет избежать дополнительного учета инструментальных ошибок, так как они уже учтены при расчете \mathbf{F} .

В этой секции рассмотрена проблема определения высоты вулканических шлейфов. Информация о положении вулканического шлейфа востребована для составления прогноза погоды и обеспечения авиационной безопасности. Повышенные концентрации SO_2 приводит к процессам сульфидирования конструкционных материалов в авиационных двигателях, что меняет их рабочие характеристики и может приводить к трудно предсказуемым поломкам. Вулканические шлейфы детектируются по повышенной концентрации SO_2 . Основная проблема при определении SO_2 заключается в том, что влияние этого газа на спектр почти того же порядка, что и влияние остальных факторов. До сих пор не предложено универсального алгоритма определения высоты шлейфа, а решение обратной задачи по Тихонову требует сильных условий регуляризации. Определение высоты SO_2 , так же как и восстановление озона, относится к обратным задачам атмосферной оптики. Для её решения можно использовать методику, описанную в части 6.1. Возможность восстановления высоты слоя SO_2 с помощью линеаризованных моделей проанализирована в работе [375]. На практике получить устойчивое решение возможно при сильной регуляризации, когда полученное решение близко к априорному. Кроме того, метод требует интенсивных вычислений. До настоящего времени не было предложено универсальных алгоритмов определения положения вулканического шлейфа из спектров GOME-2 в режиме реального времени³. Далее мы проанализируем эффективность регрессионных моделей [376] для восстановления высоты слоя SO_2 . Для машинного обучения требуется расчет больших объемов тренировочных спектральных данных, для чего необходимы быстрые радиационные коды. В этом контексте радиационный код LMDOM, в котором реализованы все методы ускорения, описанные в данной диссертации, получает дополнительную апробацию. Также мы проанализируем гибридный принцип организации системы машинного обучения для решения обратных задач, объединяющий методы линейной и нелинейной регрессии.

6.3.1 Машинное обучение для интерпретации сигнала ОЭС ОПЗ

Алгоритм интерпретации спектров, основанный на технологии машинного обучения, имеет две фазы. На первой фазе программа «учится», то есть пытается воспроизвести зависимости в тренировочных наборах данных. В нашем случае тренировочное множество содер-

³Level-2 продукт обычно содержит несколько значений общего содержания SO_2 при трех значениях высот SO_2 .

жит набор спектров, рассчитанных при разных входных данных, в том числе, при различных значениях высоты SO_2 . На второй фазе «обученный» алгоритм применяется для обработки новых данных, изначально не включенных в тренировочное множество. К преимуществам такого подхода относят возможность обучения обратного оператора, минуя процедуру явного обращения прямого оператора.

Концепция обратного оператора на основе машинного обучения изображена на рисунке 6.4. Во время тренировочной фазы рассчитывается тренировочное множество. Для улучшения репрезентативности входные данные выбираются с помощью метода «умной выборки» (smart sampling) [377], использующего квазислучайные последовательности чисел. К рассчитанному набору спектров применяются алгоритмы снижения размерности, чтобы выделить статистически значимые особенности (главные компоненты) тренировочного множества и избежать «проклятья размерности» при машинном обучении, называемого также эффектом Хьюза [378]. Далее, применяя регрессионные методы, включающие линейную регрессию и искусственные нейронные сети, мы строим искомый обратный оператор. На второй фазе оператор применяется к измерениям. Важно то, что расчет спектров, который является самым трудоемким шагом, производится только на первой фазе. Полученный оператор с вычислительной точки зрения проще и быстрее модели переноса излучения, и именно он применяется для расшифровки спектров в режиме реального времени.

Несмотря на то, что уже разработано множество различных методов снижения размерности и алгоритмов обращения, не существует обратного оператора, который был бы самым эффективным для широкого класса задач. При проектировании оператора необходимо достичь двух компромиссов:

1. Компромисс между дисперсией ошибки обратного оператора и его систематической ошибкой. Как показано в [379], методы машинного обучения, направленные на уменьшение дисперсии, приводят к росту систематической ошибки и наоборот.
2. Компромисс между точностью и устойчивостью. Например, построение оператора по как можно большему числу входных параметров может привести не только к уменьшению его ошибки, но и потере устойчивости из-за переобучения (в этом случае оператор точно воспроизводит только те зависимости, которые были в тренировочном множестве).

Хорошо зарекомендовавшая себя стратегия, хотя и не строго обоснованная, заключается в комбинировании различных методов обучения. В частности, в [380] продемонстрирована эф-

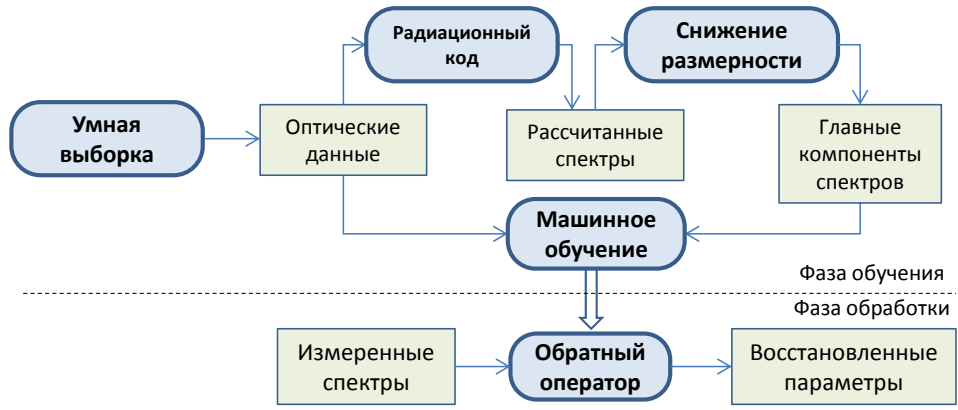


Рисунок 6.4 — Организация машинного обучения для интерпретации сигнала ОЭС ОПЗ.

эффективность сочетания нелинейного метода главных компонент с искусственными нейронными сетями. В [381] предложено использовать методы линейной регрессии для минимизирования систематической ошибки и нейронные сети для уменьшения дисперсии. Далее мы рассмотрим составные части обратного оператора.

6.3.2 Построение обратного оператора с помощью линейной регрессии

Предположим, что мы хотим определить атмосферный параметр P из спектра, описываемого функцией $R(\lambda, P, \mathbf{b})$, где вектор \mathbf{b} содержит все параметры модели за исключением P . Соответствующая обратная задача $R(\lambda, P, \mathbf{b}) \rightarrow P$ является нелинейной задачей с многими параметрами. Решить обратную задачу можно было бы легче, если бы требовалось определить P не из $R(\lambda, P, \mathbf{b})$, а из гладкой функции одного аргумента P , которая в свою очередь строится из исходного спектра $R(\lambda, P, \mathbf{b})$. Такое построение можно выполнить с помощью стандартной моделью линейной регрессии $\hat{\mathbf{L}} \in M_{W \times 1}(\mathbb{R})$ с соответствующими коэффициентами регрессии $\{l_i\}_{i=0}^N$ между P и $R(\lambda, P, \mathbf{b})$:

$$P = l_0 + \sum_{w=1}^W l_w R(\lambda_w). \quad (6.19)$$

Для вектора $\mathbf{P} = \{P_1, P_2, \dots, P_S\} \in M_{S \times 1}(\mathbb{R})$, последнее соотношение можно переписать в матричной форме как

$$\mathbf{P} = l_0 + \mathbf{R}\hat{\mathbf{L}}. \quad (6.20)$$

Тем не менее, такой метод является не устойчивым относительно возмущений в спектре и инструментальных ошибок.

Альтернативным методом является регрессия по главным компонентам “the principal component regression” (PCR). Принцип снижения размерности спектральных данных изложен в Приложении Е. Регрессионная модель строится между \mathbf{P} и координатами PCS \mathbf{X} спектральных данных:

$$P_i = c + \sum_{k=1}^K l_k x_{ik}, \quad (6.21)$$

где K – количество главных компонент, или в матричной форме

$$\mathbf{P} = c + (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}) \mathbf{F} \hat{\mathbf{L}} = c + \mathbf{X} \hat{\mathbf{L}}, \quad (6.22)$$

где c – вертикальное смещение регрессионной кривой, \mathbf{F} – базисные векторы. В этом случае $\hat{\mathbf{L}} \in M_{K \times 1}(\mathbb{R})$. И так как на практике $K \ll W$, размерности регрессионной модели и соответствующей ей обратной задачи существенно снижаются. К тому же, так как инструментальный шум практически не влияет на PCS малого порядка, регрессионная модель в целом более устойчива. Для повышения устойчивости базисные векторы ищутся как собственные векторы матрицы $\mathbf{C}_{RR} + \mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$, где \mathbf{C}_{RR} и $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$ – ковариационные матрицы спектров и шумов, соответственно. Тогда условие статистической независимости главных компонент нарушается, а сами компоненты называются проецированными главными компонентами (projected principal components) [381]. Если статистика шумов неизвестна, то хорошим приближением может служить $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon} \approx \alpha \mathbf{I}$, где \mathbf{I} – единичная матрица, а α – параметр регуляризации. Добавление $\mathbf{C}_{\varepsilon\varepsilon}$ к \mathbf{C}_{RR} сдвигает спектр собственных значений в положительную сторону, что уменьшает влияние главных компонент высокого порядка.

Основной недостаток PCR-модели заключается в том, что базисные векторы \mathbf{F} определяются только множеством \mathbf{R} , однако информация о векторе \mathbf{P} не принимается во внимание. Поэтому может так получиться, что первые главные компоненты для \mathbf{R} содержат мало информации о \mathbf{P} , чем компоненты более высокого порядка, и корреляция между \mathbf{X} и \mathbf{P} будет слабой. Похожим на PCR-метод является метод, основанный на регрессии парциальных наименьших квадратов (Partial Least Squares Regression – PLSR)⁴. В отличие от PCR-метода, PLSR-метод строит проекции не только для \mathbf{R} , но и для P . В [382] авторы продемонстри-

⁴К сожалению, автору не удалось найти устойчивое русскоязычное название. Далее по тексту используется наименование «PLSR-модель»

ровали, что PLSR-модель способна описать интересные параметры меньшим количеством компонент, чем PCR-модель, при одинаковой точности.

PLSR-модель основана на линейной декомпозиции и \mathbf{R} , и \mathbf{P} :

$$\mathbf{R} \approx \check{\mathbf{R}}\mathbf{Q}^T, \quad (6.23)$$

$$\mathbf{P} \approx \check{\mathbf{P}}\mathbf{W}^T, \quad (6.24)$$

где $\check{\mathbf{R}} \in M_{S \times K}(\mathbb{R})$ и $\check{\mathbf{P}} \in M_{S \times K}(\mathbb{R})$ – новые координаты для \mathbf{R} и \mathbf{P} , соответственно, а \mathbf{Q} и \mathbf{W} – матрицы соответствующих базисных векторов. Матрицы \mathbf{Q} и \mathbf{W} конструируются таким образом, чтобы максимизировать коэффициент корреляции между $\check{\mathbf{R}}$ и $\check{\mathbf{P}}$ ($\text{corr}(\check{\mathbf{R}}, \check{\mathbf{P}})$) (подразумевается, $\text{corr}(\check{\mathbf{R}}, \check{\mathbf{P}}) > \text{corr}(\mathbf{X}, \mathbf{P})$). Для нахождения $\check{\mathbf{R}}$ и $\check{\mathbf{P}}$ применяется алгоритм, основанный на теореме о спектральном разложении матриц. Первая координата $\check{\mathbf{r}}_1 \in M_{S \times 1}(\mathbb{R})$ для $\check{\mathbf{R}} = \{\check{\mathbf{r}}_1, \dots, \check{\mathbf{r}}_K\}$ рассчитывается как $\check{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{R}\mathbf{q}$, где \mathbf{q} – собственный вектор, соответствующий максимальному собственному значению матрицы $\mathbf{R}^T\mathbf{P}\mathbf{P}^T\mathbf{R}$. Аналогично, первая координата для \mathbf{P} ($\check{\mathbf{p}}_1 \in M_{S \times 1}(\mathbb{R})$) рассчитывается как $\check{\mathbf{p}}_1 = \mathbf{P}\mathbf{w}$, где \mathbf{w} – собственный вектор, соответствующий максимальному собственному значению матрицы $\mathbf{P}^T\mathbf{R}\mathbf{R}^T\mathbf{P}$. После того, как $\check{\mathbf{r}}_1$ и $\check{\mathbf{p}}_1$ найдены, процедура повторяется для матриц $\mathbf{R}_1 = \mathbf{R} - \check{\mathbf{r}}_1\check{\mathbf{r}}_1^T\mathbf{R}$ и $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P} - \check{\mathbf{r}}_1\check{\mathbf{r}}_1^T\mathbf{P}$ для нахождения $\check{\mathbf{r}}_2$ и $\check{\mathbf{p}}_2$. Процедура повторяется рекурсивно до тех пор, пока не найдены все требуемые координаты. PLSR-метод может быть обобщен на случай, когда мы хотим восстановить набор скоррелированных параметров (например, температурный профиль), а не один параметр P . В этом случае мы имеем дело с методом канонических корреляций [383, 384].

6.3.3 Расчет тренировочного множества

Для того, чтобы построить PCR- и PLSR-модели, необходимо иметь тренировочное множество, для которого все параметры известны. Для расчетов используется код LMDOM. Неупругое рассеяние учитывается в первом приближении согласно методу, описанному в [30]. Расчет производится в спектральном диапазоне 310 – 335 нм с разрешением 0.005 нм. Далее спектры сворачиваются с аппаратной функциями GOME-2A/B. Профили температуры и давления соответствуют модели US-standard. В модели присутствуют O₃ и SO₂. Для профилей O₃ используется климатологическая база TOMS v.7. Распределение SO₂ по высоте имеет закон Гаусса с полной шириной на полувысоте 2.5 км. Далее под высотой слоя SO₂ понимается положение максимума распределения. Тренировочное множество рассчитывает-

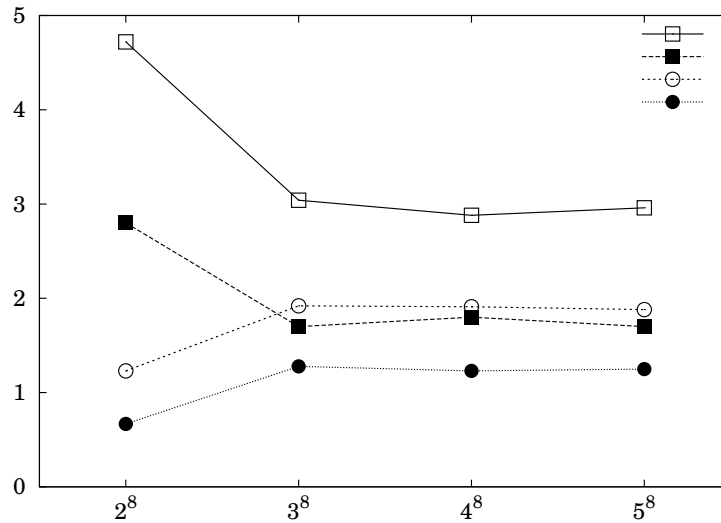


Рисунок 6.5 — Статистические моменты (среднее, дисперсия, коэффициент асимметрии и коэффициент эксцесса) спектральных данных как функция числа спектров в выборке. На рисунке значения моментов приведены к одному масштабу.

ся при следующих значениях 8 исходных параметров: высота слоя SO₂ (2.5-20 км), общее содержание SO₂ (0-1000 DU), альbedo поверхности (0-1), высота поверхности (0-8 км), общее содержание O₃ (225-525 DU), угол падения (0-90), угол зондирования (0-60), относительный азимутальный угол (RAA) (0-180). Для того, чтобы исходные данные не были скоррелированы между собой, для построения сетки исходных данных используется алгоритм Халтона (Halton algorithm) [385], который генерирует последовательность квази-случайных точек, обеспечивая их равномерное распределение внутри единичного гиперкуба. Для нахождения оптимального числа спектров, необходимых для построения репрезентативной выборки, следуя работам [386, 387], необходимо проверить сходимость первых четырех статистических моментов выборки: среднее, дисперсия, коэффициент асимметрии и коэффициент эксцесса. На рисунке 6.5 показана зависимость статистических моментов от числа спектров в выборке. При числе спектров превышающем 3^8 наблюдается их сходимость. Таким образом, тренировочное множество состоит из 4^8 спектров. В качестве тестового множества используется выборка из 3^8 спектров. Заметим при этом, что эти две выборки не пересекаются благодаря особенностям алгоритма Халтона. Время счета 4^8 спектров не превышает 10 минут.

6.3.4 Решение обратной задачи для расчетных спектров

Для нахождения количества главных компонент для регрессионных моделей рассмотрим зависимость коэффициента корреляции между расчетным и актуальным значениями

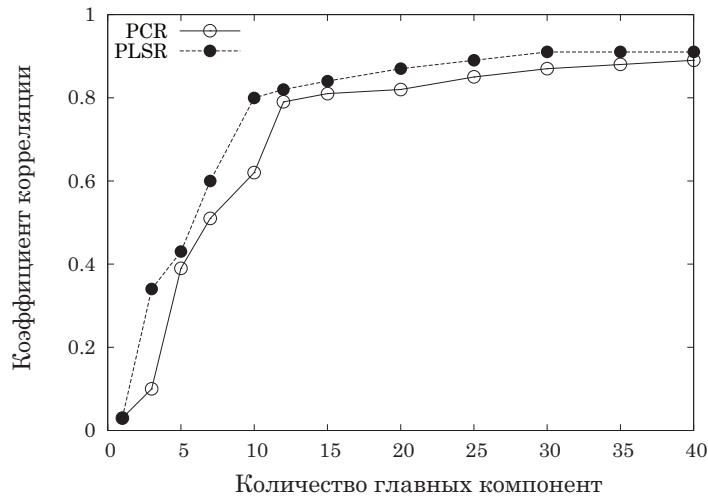


Рисунок 6.6 — Коэффициент корреляции между восстановленным значением высоты шлейфа и её истинным значением как функция числа главных компонент для PCR-модели и PLSR-модели.

высоты шлейфа на рисунке 6.6 для PCR-модели и PLSR-модели. Как и ожидалось, коэффициент корреляции для PLSR больше коэффициента корреляции для PCR при любом количестве главных компонент. Для обоих методов при малом числе главных компонент коэффициент корреляции растет линейно с числом главных компонент. При достижении 15 главных компонент коэффициент корреляции перестает существенно расти и выходит на плато. Поэтому приблизительно $K = 15$ главных компонент достаточно, чтобы описать информацию, содержащуюся в спектрах, о высоте шлейфа.

На рисунках 6.7 и 6.8 показаны гистограммы относительных ошибок определения высоты шлейфа методами PCR и PLSR с $K = 15$ и $K = 30$ главными компонентами, соответственно. Ширина распределения при $K = 30$ меньше, чем при $K = 15$, а средняя ошибка PLSR меньше средней ошибки PCR для обоих случаев.

На рисунках 6.9 и 6.10 показаны восстановленные значения высоты вулканического шлейфа как функция истинных значений высот (показаны каждая 20-ая точка для разборчивости картинки). Точки распределены около прямой $y(x) = x$. Ошибка больше для малых высот шлейфа. Первая (очевидная) причина тому заключается в том, что влияние шлейфа SO_2 на спектр на верхней границе атмосферы уменьшается с высотой шлейфа. Поэтому при малых высотах методы восстановления менее чувствительны к наличию SO_2 , чем при больших высотах. Вторая (вероятная) причина заключается в том, что функция яркости при малых высотах шлейфа является более нелинейной функцией, в то время как по сути PCR- и PLSR-модели являются линейными. В таблице 6.2 показан коэффициент корреляции между ошибкой определения высоты шлейфа и другими входными параметрами. Как видно из

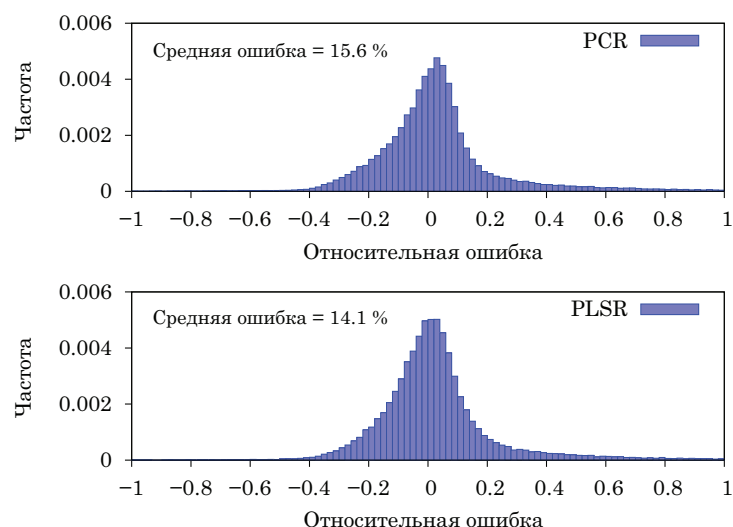


Рисунок 6.7 — Гистограмма относительной ошибки восстановления высоты шлейфа с помощью PCR-модели и PLSR-модели при $K = 15$ главных компонентах.

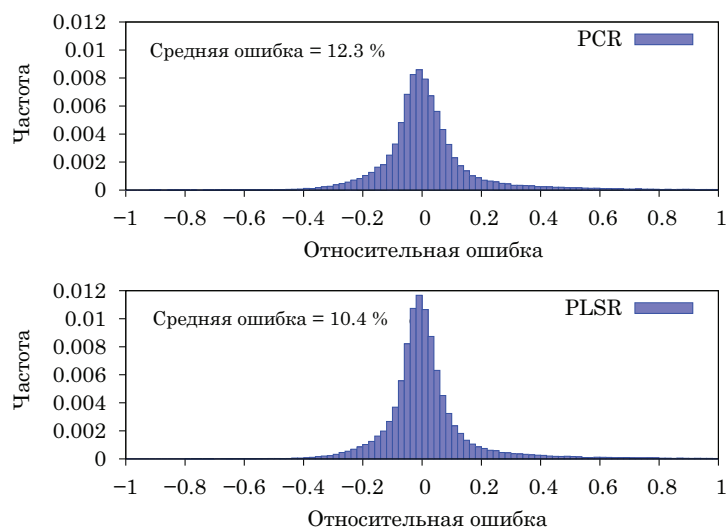


Рисунок 6.8 — То же, что на рисунке 6.7, но при $K = 30$ главных компонентах.

таблицы, ошибка слабо коррелирует с другими входными параметрами. Таким образом, можно утверждать, что PCR- и PLSR- модели игнорируют ту часть спектральной информации, которая не относится к высоте шлейфа.

6.3.5 Оценка чувствительности к шуму в спектре

Далее мы применим PLSR-модели и PCR-модели к данным, содержащим шум, и изучим влияние шума на результаты восстановления высоты шлейфа. К расчетным спектрам добавлен гауссовый шум. Коэффициенты корреляции и средние ошибки приведены в Таблице 6.3. Видно, что с ростом уровня шума коэффициент корреляции уменьшается, а средняя ошибка

Таблица 6.2 — Коэффициент корреляции между относительной ошибкой определения высоты шлейфа и некоторыми входными параметрами модели

Входные параметры	PLSR	PCR
Высота шлейфа	-0.4	-0.48
Общее содержание SO_2	-0.06	-0.06
Косинус угла падения	0.04	0.06
Косинус угла визирования	-0.03	-0.03
Сосинус азимутального угла	0.03	0.02
Альбедо поверхности	-0.07	-0.08
Высота поверхности	-0.15	-0.17
Общее содержание O_3	-0.008	-0.005

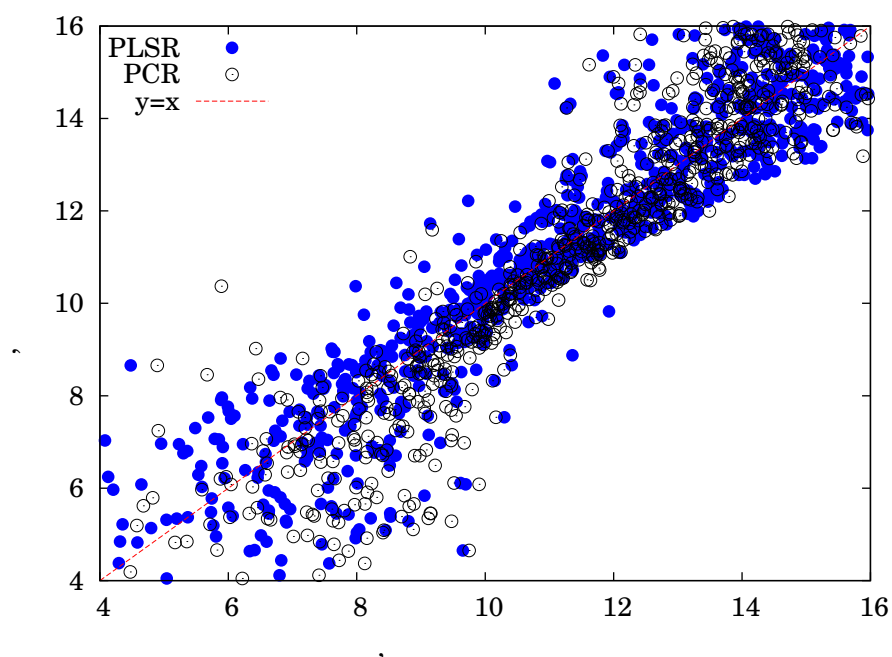


Рисунок 6.9 — Результаты регрессии по PLSR-модели и PCR-модели по $K = 15$ главным компонентам для расчетных спектров.

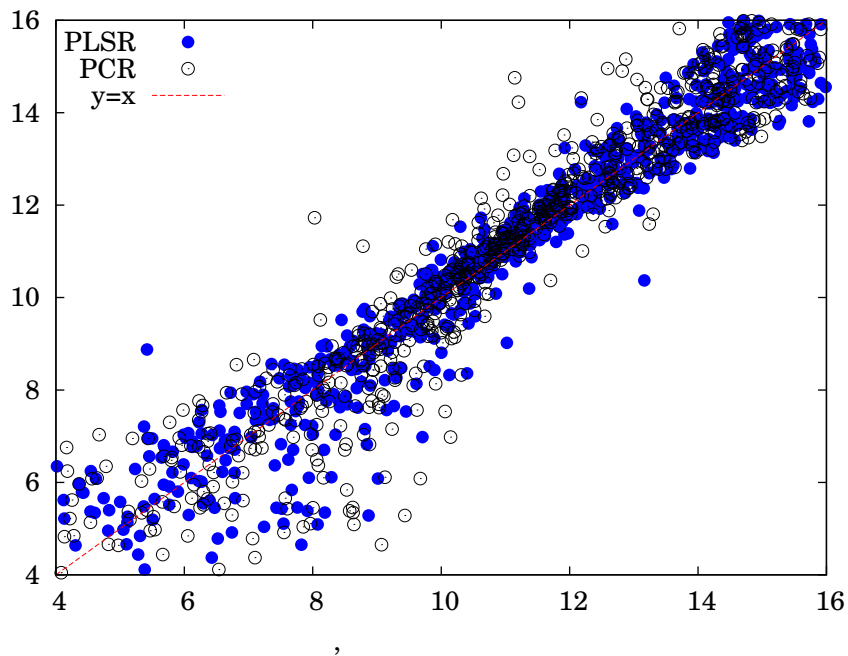


Рисунок 6.10 — То же, что на рисунке 6.9, но для $K = 30$ главных компонент.

увеличивается. При отношении «сигнал-шум» $\text{SNR} \sim 1000$ PLSR-модель и PCR-модель могут получить информацию о высоте шлейфа. При отношении $\text{SNR} \sim 100$ информация о высоте шлейфа не доступна (о чем говорит маленький коэффициент корреляции). Заметим также, что для зашумленных спектров (в отличие от «точных спектров») использование более 15 главных компонент не повышает точность восстановления высоты шлейфа, так как на главные компоненты высокого порядка сильное влияние оказывает шум. Зависимость абсолютной ошибки определения высоты слоя SO_2 от общего содержания SO_2 и «истинного» значения высоты слоя SO_2 показана на рисунке 6.11 при отношении сигнала к шуму $\text{SNR}=700$. Ошибка увеличивается с уменьшением общего содержания SO_2 . Надежно определить высоту слоя SO_2 с ошибкой 1 км можно при общем содержании более 50 единиц Добсона, что совпадает с выводами исследования из [388]. Однако следует заметить, что это оценка снизу. На практике ошибка определения высоты слоя SO_2 может быть выше.

В приведенных расчетах не было обнаружено существенного повышения стабильности алгоритма при вычитания полинома малой степени из спектра [389].

Таблица 6.3 — Коэффициенты корреляции и средние относительные ошибки определения высоты шлейфа при разном значении отношения сигнал-шум SNR

SNR	PLSR		PCR	
	$K = 15$	$K = 30$	$K = 15$	$K = 30$
Коэффициент корреляции				
∞	0.84	0.91	0.81	0.84
1000	0.81	0.88	0.75	0.79
500	0.77	0.81	0.72	0.75
100	0.62	0.64	0.55	0.58
50	0.31	0.31	0.29	0.29
Средняя относительная ошибка, %				
∞	14.1	10.1	16.6	14.0
1000	15.8	13.2	17.2	16.4
500	17.1	16.1	17.8	17.0
100	24.3	23.0	23.8	23.2
5	28.5	28.3	29.3	29.2

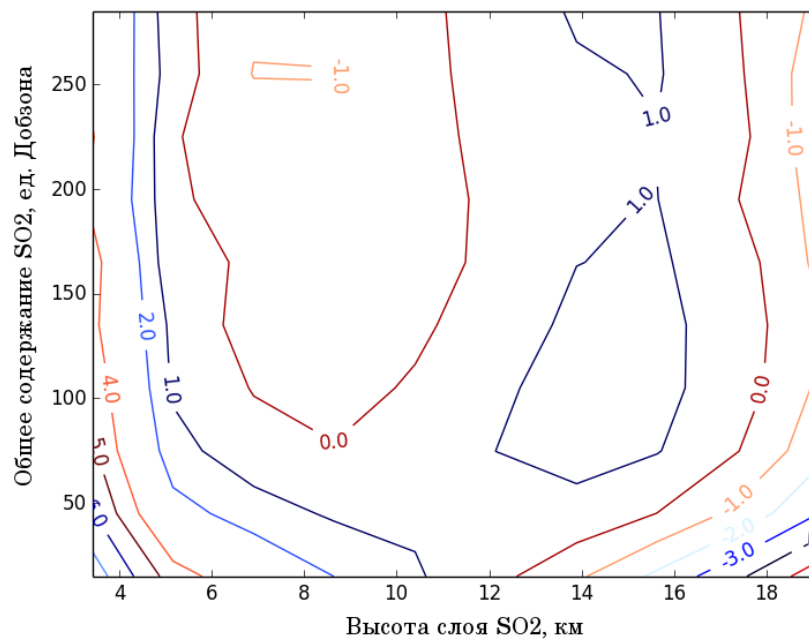


Рисунок 6.11 — Зависимость абсолютной ошибки определения высоты слоя SO₂ от общего содержания SO₂ и «истинного» значения высоты слоя SO₂.

6.3.6 Повышение точности решения обратной задачи с помощью нейронных сетей

6.3.6.1 Учет влияния общего содержания SO_2 на результат восстановления высоты шлейфа

Одним из способов повысить точность регрессионной модели (другими словами, увеличить коэффициент корреляции между истинным значениям и восстановленным значением) является включение в модель кроме спектра и других параметров, например, общего содержания SO_2 . Сделать это можно с помощью искусственных нейронных сетей [390, 391]. Одно из применений нейронных сетей заключается в нахождении аппроксимации многопараметрических нелинейных функций. Искусственные нейронные сети состоят из искусственных нейронов, каждый из которых описывается нелинейной функцией, например, сигмоидом⁵ $1/(1 + e^{-x})$. Для тренировки сети использовался алгоритм Левенберга-Марквардта (Levenberg-Marquardt training algorithm [393, 394]). Набор сгенерированных спектров делится на три множества:

- training set – множество, используемое для обучения искусственной нейронной сети,
- validation set – множество, используемое для определения момента окончания процесса обучения, а также для изменения структуры нейронной сети,
- test set – множество, на котором проверяется точность обученной сети.

Рассмотрены две схемы. В Схеме 1 в качестве исходных параметров сети используются $K=15$ главных компонент и общее содержание SO_2 ; в Схеме 2 используются только $K=15$ главных компонент. Средняя ошибка и коэффициент корреляции показаны в Таблице 6.4. Видно, что Схема 1 несколько точнее Схемы 2. То есть использование информации об общем содержании SO_2 улучшает алгоритм в целом. Однако она заранее не известна и для её определения необходимо знать положение вулканического шлейфа. Поэтому в рамках Схемы 1 необходимо использовать итерационную процедуру, что несколько усложняет алгоритм в целом. К тому же преимущество Схемы 1 перед Схемой 2 не значительно. Поэтому для операционного алгоритма Схема 2 более эффективна, чем Схема 1.

⁵Согласно аппроксимационной теореме [392], с помощью линейных операций и каскадного соединения можно из произвольного нелинейного элемента получить устройство, вычисляющее любую непрерывную функцию с некоторой наперед заданной точностью. Это означает, что теоретически нелинейная характеристика нейрона может быть произвольной.

Таблица 6.4 — Коэффициенты корреляции и средние ошибки искусственных нейронных сетей

	Схема 1		Схема 2	
	Средняя ошибка	Коэффициент корреляции	Средняя ошибка	Коэффициент корреляции
Training	13%	0.94	20%	0.89
Validation	13%	0.94	20%	0.89
Testing	14%	0.94	21%	0.88

6.3.6.2 Одновременное использование линейных и нелинейных моделей

Как указано в [381], вычислительная эффективность алгоритмов может быть повышена, если разделить исходную задачу на линейную и нелинейную части. При этом линейная часть описывается линейными моделями (например, PCR), а для нелинейной части используются искусственные нейронные сети. В этом контексте мы рассмотрим 3 случая:

- Нейронная сеть NN1 предсказывает высоту шлейфа, используя 4 главные компоненты;
- Нейронная сеть NN2 предсказывает высоту шлейфа, используя результат PLSR-модели и 4 главные компоненты. В свою очередь, PLSR-модель использует $K = 30$ компонент;
- Нейронная сеть NN3 использует 30 главных компонент.

В Таблице 6.5 приведены коэффициенты корреляции, средние ошибки и времена обучения указанных выше нейронных сетей. Процесс обучения автоматически останавливался, когда ошибка для validation set начинала увеличиваться. Из таблицы можно сделать два вывода:

1. Использование результатов PLSR-модели в качестве входного параметра нейронной сети существенно повышает точность алгоритма в целом (средняя относительная ошибка равна 72 % у сети NN1 против 13 % у сети NN2).
2. Благодаря тому, что часть информации описывается линейной моделью, мы можем использовать нейронные сети простой конфигурации для описания «нелинейной части». Как следствие, значительно сокращается время обучения нейронной сети (12 секунд для сети NN2 против 220 секунд для сети NN3).

Таким образом, сеть NN2 является самой эффективной с точки зрения скорости счета и точности.

Таблица 6.5 — Сравнение трех искусственных нейронных сетей по скорости обучения и точности

Входные данные Время обучения	NN (4 PCs) 10 с		PCR + NN(4 PCs) 12 с		NN(30 PCs) 220 с	
	Средняя отн. ошибка	Коэф. корреля- ции	Средняя отн. ошибка	Коэф. корреля- ции	Средняя отн. ошибка	Коэф. корреля- ции
Training	72%	0.63	13%	0.94	10%	0.98
Validation	72%	0.63	13%	0.94	10%	0.98
Testing	72%	0.62	14%	0.94	11%	0.96

Таблица 6.6 — Рассмотренные вулканы, к которым был применен гибридный PLSR+NN алгоритм

Название	Дата	Рисунок	Валидация
Bardarbunga	5.09.2014	6.12	IASI
Kasatochi	10.08.2008	6.13	CALIOP
Etna	4.12.2015	6.14	CALIOP ⁶
Calbuco	27.08.2015	6.15	—
Nabro	16.06.2011	6.16	IASI [396]
Grimsvotn	23.05.2011	6.17	GOME-2 [399]
Eyjafjallajokull	5.05.2010	6.18	GOME-2 [398, 399]

6.3.7 Обработка измерений GOME-2

Описанный алгоритм определения высоты диоксида серы был применен к измерениям GOME-2 над очагами вулканической активности. Восстановление общего содержания диоксида серы выполнено Dr. Pascal Hedelt (DLR). Рассмотренные вулканы приведены в Таблице 6.6 вместе с источниками для валидации результатов. Результаты, полученные для Этны (8-10 км), подтверждаются измерениями систем CATS (Cloud Aerosol Transport System) на борту МКС (10-12 км) [395] и MSG/SEVIRI (E.Carboni, pers. comm.) и CALIOP/CALYPSO (L.Clarisse, pers. comm.). Измерения с помощью IASI (EPS/MetOp) для вулкана Бардарбунга показали высоту слоя SO₂ более 4 км. Результат PLSR+NN модели находится в диапазоне 4-8 км. Для вулкана Набро результаты PLSR+NN модели следующие: среднее значение высоты около 10 км (14 км рядом с вулканом). Данные IASI - 10-12 км в окрестности и 15 км у вулкана [396]. Для вулкана Эйяфьядлайёкюдль предсказание PLSR+NN модели (6.5-9 км) хорошо совпало с результатами работ [397–399] (5-10 км).

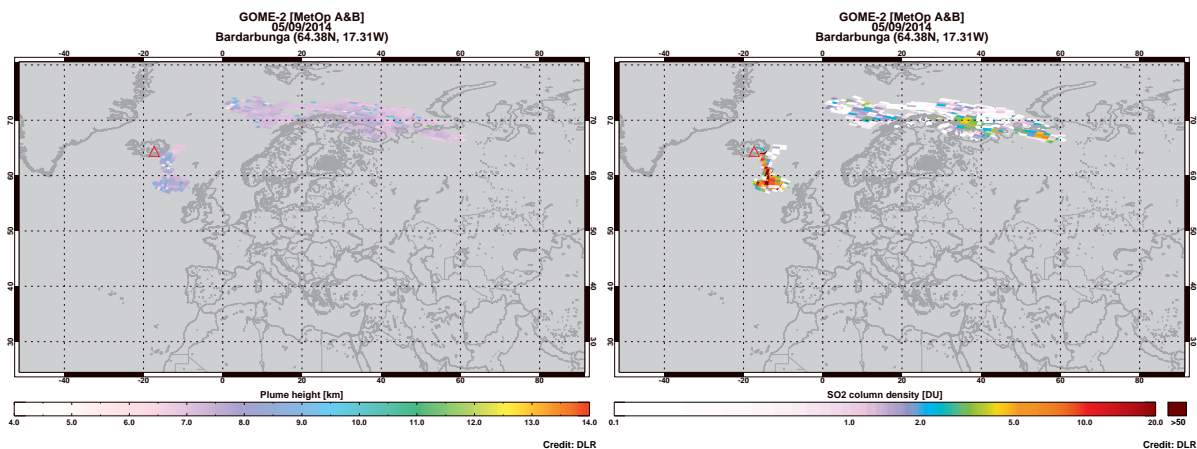


Рисунок 6.12 — Восстановленная карта высоты (слева) и общего содержания (справа) диоксида серы для вулкана Bardarbunga (5.09.2014).

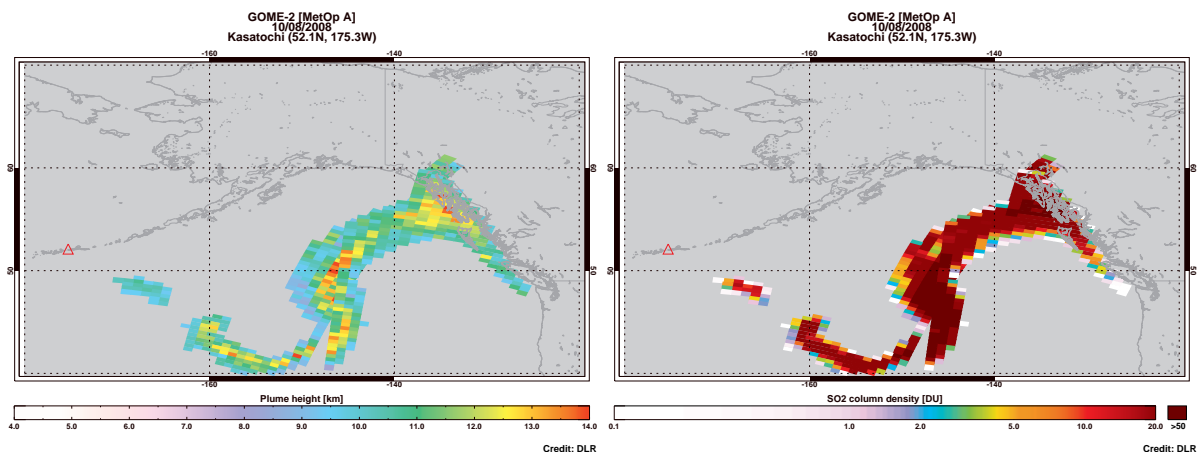


Рисунок 6.13 — То же, что на рисунке 6.12, но для Kasatochi (10.09.2008).

6.4 Определение концентрации озона и параметров облака на основе стохастической модели

Для спектрометров типа GOME-2 и TROPOMI характерен непрерывный режим «сканирования» атмосферы. Для определения озона по измерениям в текущем пикселе необходимо знать актуальные значения оптической толщины облака и положения верхней границы облака. Поэтому восстановления параметров озонового слоя и облака производятся согласовано, но из разных спектральных интервалов: 315-335 нм – общее содержание озона, 758 – 772 нм (O2A band) – параметры облака. При этом для устойчивости алгоритма обращения принципиально важно, чтобы расчет в двух спектральных интервалах осуществлялся в рамках единой физической модели. Принципиальная схема расчета показана на рисунке 6.19. В полосе O2A гладкая компонента спектра (континуум) зависит от оптической толщины облака, а

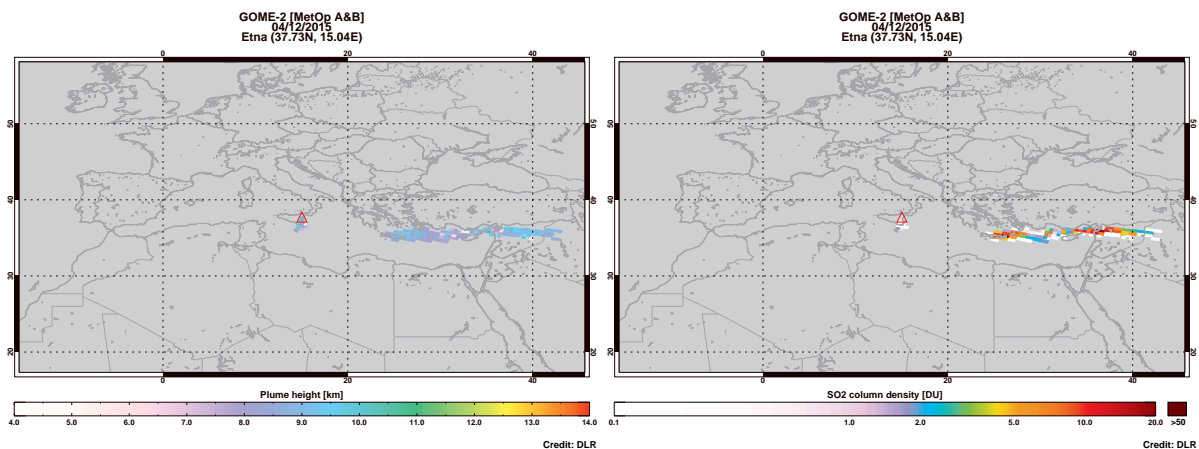


Рисунок 6.14 — То же, что на рисунке 6.12, но для Etna (4.12.2015).

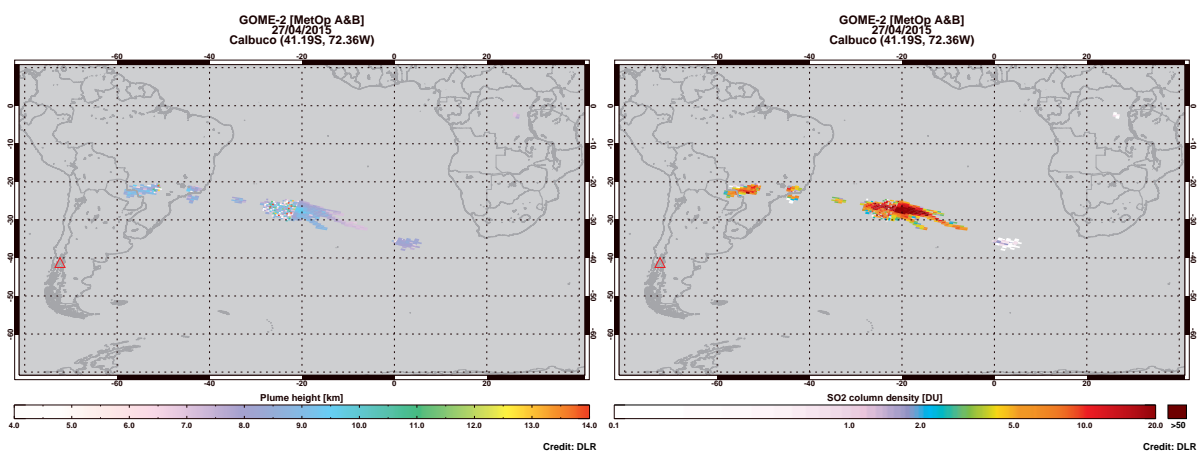


Рисунок 6.15 — То же, что на рисунке 6.12, но для Calbuco (27.08.2015).

форма полосы поглощения зависит от положения облака. Параметр облачности определяется с помощью алгоритма OCRA.

Sahalan et al. [334] показали, что пиксели с неоднородным облаком темнее пикселей с однородным облаком при одинаковой средней оптической толщине. Это приводит к тому, что оптическая толщина, восстанавливаемая в рамках модели независимых пикселей отличается в большую сторону от среднего значения, как указано в [400]. Поэтому имеет смысл определять параметры облака в рамках более реалистичной модели, в частности, стохастической. Тогда в алгоритм определения концентрации озона также необходимо внести изменения.

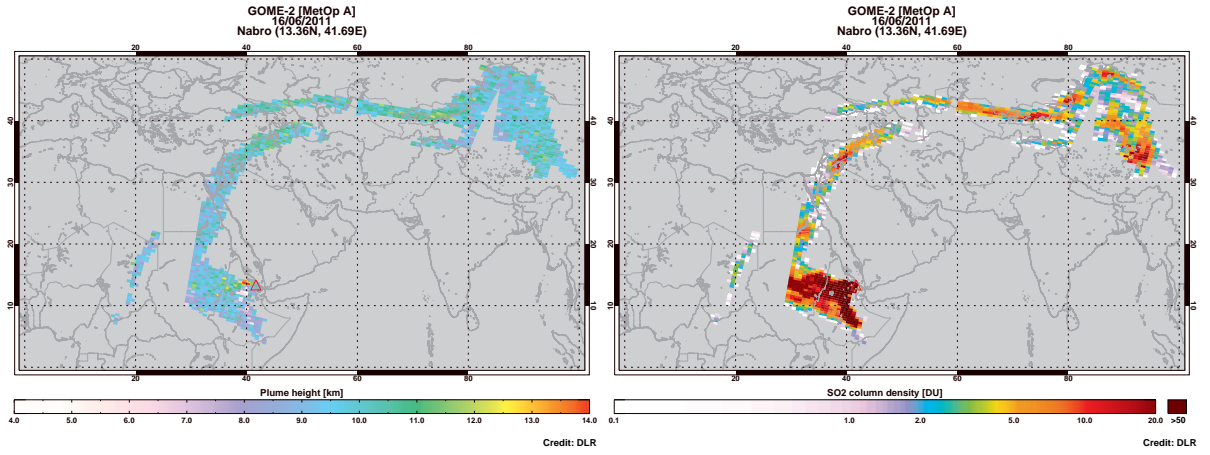


Рисунок 6.16 — То же, что на рисунке 6.12, но для Nabro (16.06.2011).

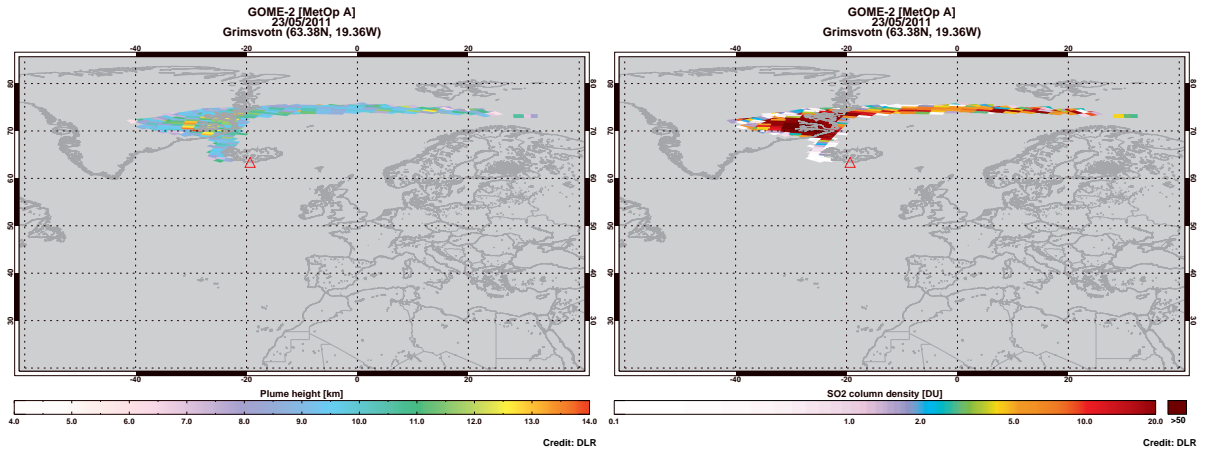


Рисунок 6.17 — То же, что на рисунке 6.12, но для Grimsvotn (23.05.2011).

6.4.1 Расчет коэффициентов замыкания для модели внутреннего смешивания

Проанализируем эффективность модели внутреннего смешивания в задачах моделирования сигнала в полосе Хюггинса. Мы начнем с расчета соответствующих коэффициентов замыкания модели. Расчет производится в спектральном интервале 315 нм 335 нм с разрешением $\Delta\lambda = 0.25$ нм, верхняя граница атмосферы $z_t = 50$ км, шаг дискретизации по высоте $\Delta z = 2.5$ км, профили озона взяты из климатологической модели [252]. Геометрическая толщина $\Delta h = 1$ км. Расчет выполнен для моделей облака из климатологической базы ОРАС, а также для облаков с заданными значениями альбеда однократного рассеяния ω_1 и параметра асимметрии g_1 . Коэффициенты замыкания определяются как

$$\eta_{\text{opt}}(\bar{f}, \mathbf{b}_{\text{db}}) = \arg \min_{\eta} \left\| \bar{I}(\eta \bar{f}, z_t, \theta, \mathbf{b}_{\text{db}}) - \bar{I}_{\text{STM}}(z_t, \theta, \mathbf{b}_{\text{db}}) \right\|.$$

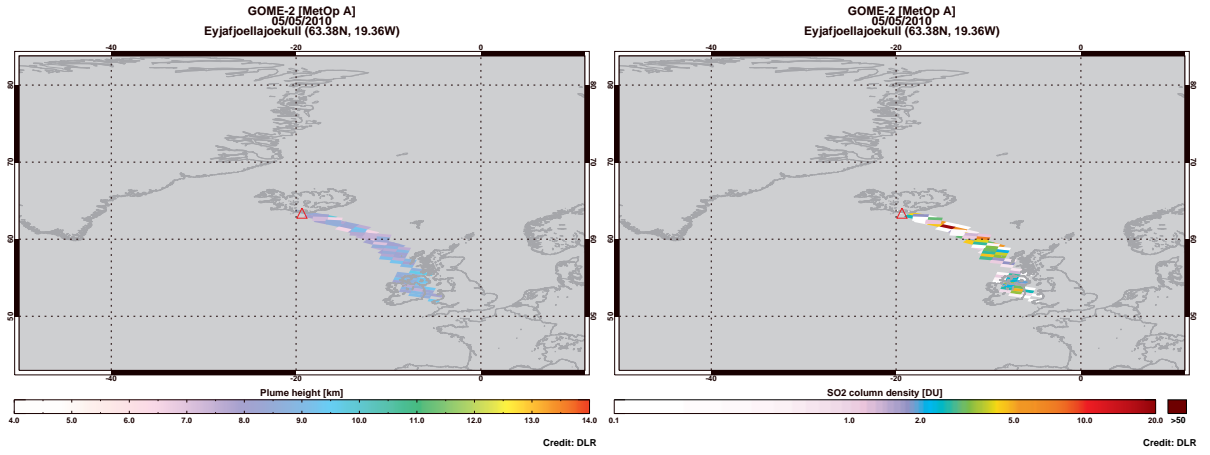


Рисунок 6.18 — То же, что на рисунке 6.12, но для Eyjafjallajökull (5.05.2010).

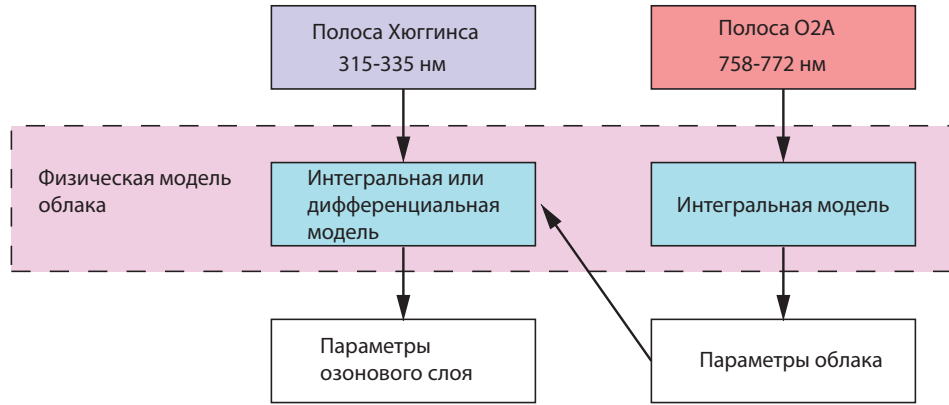


Рисунок 6.19 — Принципиальная схема совместного определения параметров озонового слоя и облака.

где $\mathbf{b}_{\text{db}} = [\theta_{\odot}, h_1, \tau_1, A]$. База данных рассчитана для следующих параметров:

$$\theta_{\odot} = \{0^{\circ}, 15^{\circ}, 30^{\circ}, 45^{\circ}, 60^{\circ}\}$$

$$h_1 = \{2.0, 4.0, 8.0, 10.0, 12.0, 16.0 \text{ км}\}$$

$$\tau_1 = \{2.0, 4.0, 8.0, 10.0, 12.0, 16.0\}$$

$$A = \{0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5\}$$

$$p = \{0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8\}$$

$$\bar{f} = \{0.16, 0.27, 0.38, 0.5, 0.62, 0.73, 0.85\}.$$

Для каждой модели облака рассмотрено 6300 сценариев. На рисунке 6.20 показаны зависимости η_{opt} от A , h_1 , θ_{\odot} и τ_1 для облака с $\omega_1 = 0.9$ и $g_1 = 0.85$. Как видно, η_{opt} сильно зависит от τ_1 , умеренно от θ_{\odot} и слабо от h_1 и A .

На рисунке 6.21 показаны гистограммы относительных ошибок

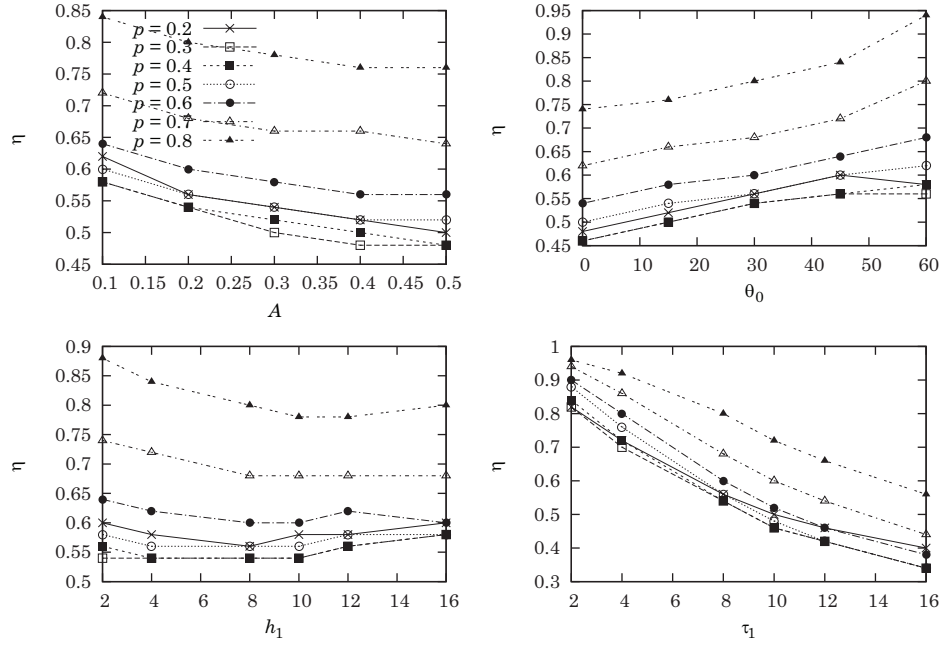


Рисунок 6.20 — Значения η_{opt} как функции A, h_1, θ_0 и τ_1 . при различных значениях вероятности заполнения p .

$$\varepsilon(\mathbf{b}_{\text{db}}) = \|\bar{I}(z_t, \theta, \mathbf{b}_{\text{db}}) - \bar{I}_{\text{STM}}(z_t, \theta, \mathbf{b}_{\text{db}})\| / \|\bar{I}_{\text{STM}}(z_t, \theta, \mathbf{b}_{\text{db}})\|,$$

усредненных по θ для модели внутреннего смешивания и модели внешнего смешивания. Средняя ошибка и ширина распределения ошибки у последней примерно в три раза больше, чем у модели внутреннего смешивания. Также было обнаружено, что ошибка модели внешнего смешивания увеличивается с ростом альбедо поверхности, как показано на рисунке 6.22. Эти результаты говорят о превосходстве модели внутреннего смешивания над моделью внешнего смешивания.

На практике коэффициент замыкания $\eta(\mathbf{b})$ для текущего значения \mathbf{b} рассчитывается с помощью многомерной линейной интерполяции по базе $\eta_{\text{opt}}(\mathbf{b}_{\text{db}})$. Чтобы проверить устойчивость такой схемы, были посчитаны средние ошибки $\varepsilon(\mathbf{b})$, где вектор состояния \mathbf{b} строится на сетке

$$\theta_0 = \{10^\circ, 20^\circ, 40^\circ, 50^\circ\}$$

$$h_1 = \{6.0, 9.0, 11.0, 14.0 \text{ км}\}$$

$$\tau_1 = \{6.0, 9.0, 11.0, 14.0\}$$

$$A = \{0.15, 0.25, 0.35, 0.45\}$$

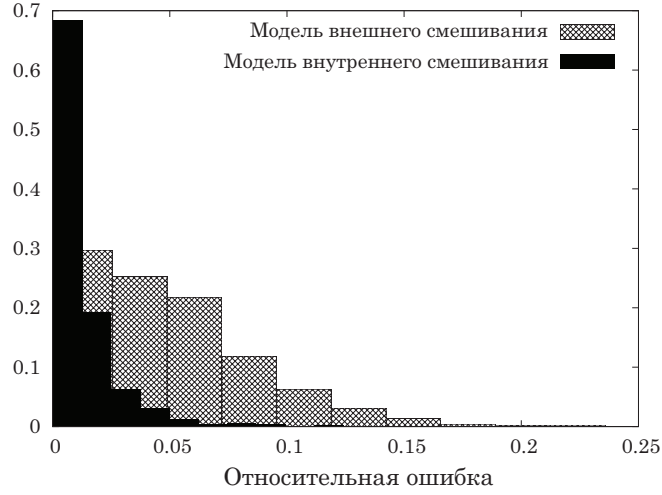


Рисунок 6.21 — Гистограммы относительных ошибок $\varepsilon(\mathbf{b})$ для моделей внутреннего и внешнего смешивания.

Всего было рассмотрено 1792 атмосферных сценария для проверки устойчивости интерполяционной схемы. Соответствующие ошибки показаны на рисунке 6.22, на котором видно, что $\varepsilon(\mathbf{b})$ соответствуют $\varepsilon(\mathbf{b}_{\text{аб}})$ и нету дополнительного уширения в гистограмме ошибок⁷. С практической точки зрения, модель внутреннего смешивания наиболее подходит для моделирования сигнала отраженного излучения в условиях стохастической облачности, так как основана на быстрой одномерной модели и превышает по точности модель независимых пикселей.

6.4.2 Совместное определение оптической толщины облака и профиля озона из полосы Хюггинса

Проанализируем возможность одновременного определения параметров облака и профиля озона по измерениям в полосе Хюггинса 315 – 335 нм. Так как коэффициент замыкания модели внутреннего смешивания зависит от оптической толщины облака, решение обратной задачи производится итерационно:

1. определяется эквивалентная оптическая толщина $\tau_1^{\text{е}}$ с помощью регуляризации Тихонова;
2. оптическая толщина облака τ_1 определяется из решения нелинейного уравнения $\bar{f}\eta(\tau_1)\tau_1 = \tau_1^{\text{е}}$.

⁷Также можно увидеть, что значения $\varepsilon(\mathbf{b})$ почти равны значениям, полученным в результате линейной интерполяции близлежащих значений $\varepsilon(\mathbf{b}_{\text{аб}})$.

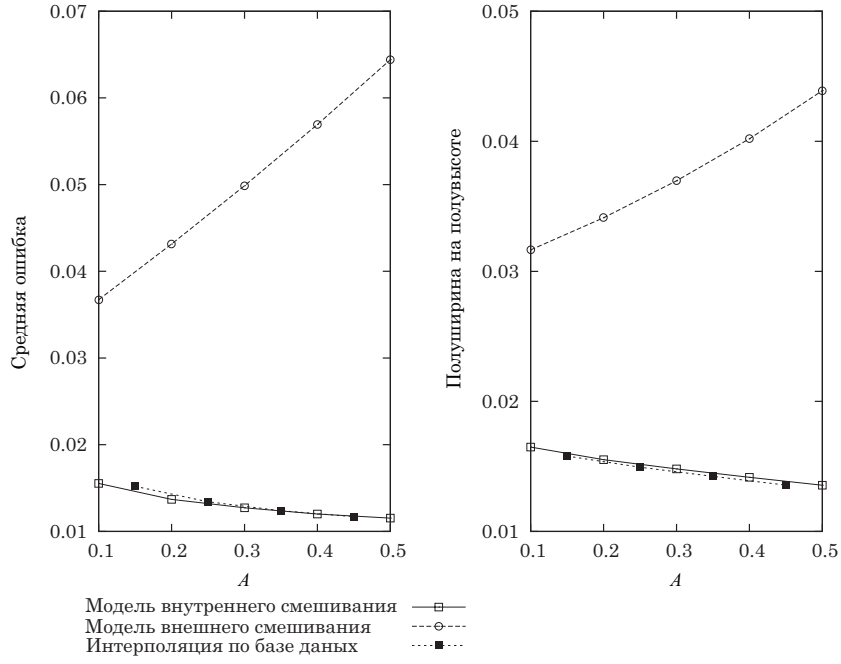


Рисунок 6.22 — Среднее значение ошибки моделей и полуширина на полувысоте $\varepsilon(\mathbf{b}_{\text{db}})$ как функции альбедо поверхности для моделей внутреннего и внешнего смешивания.

Исследуем точность восстановления оптической толщины облака в рамках модели внутреннего смешивания. Параметры сценария следующие: $\theta_{\odot} = 30^\circ$, $h_1 = 4$ км, $A = 0.2$, угол визирования $\theta = 45^\circ$, геометрическая толщина облака $\Delta h = 1$ км. Вектор состояния \mathbf{x} содержит только оптическую толщину облака; т.е. $n = 1$ и $[\mathbf{x}]_1 = \tau_1$. Начальное приближение $\tau_{1i} = 8$, истинное значение $\tau_1 = 12$. Для τ_1 рассчитан «идеальный спектр» $\mathbf{y} = \mathbf{F}(\tau_1)$, к которому затем добавлен гауссовый шум с нулевым средним значением и стандартным отклонением σ

$$\mathbf{y}^\delta = \mathbf{y} + \delta.$$

Отношение сигнал-шум (signal-to-noise (SNR)) определяется как $1/\text{SNR} = \frac{\sqrt{m}\sigma}{\|\mathbf{y}\|}$, где $m = 88$ — число спектральных точек в диапазоне 315 – 335 нм. Используются единичная регуляризационная матрица и параметр регуляризации $\alpha = \sigma^{1.8}$.

На рисунке 6.23 показана зависимость относительной ошибки τ_1 от SNR. При SNR = 300 ошибка восстановления τ_1 примерно 6 %. Далее с ростом SNR ошибка уменьшается до 1%. Решение обратной задачи иллюстрируется рисунком 6.24, на котором показаны спектр, соответствующий начальному приближению, синтетическое измерение и спектр при восстановленном значении оптической толщины.

Выберем SNR = 700. В качестве регуляризационной матрицы, соответствующей профилю озона, взята матрица Холецкого, рассчитанной для ковариационной матрицы профилей

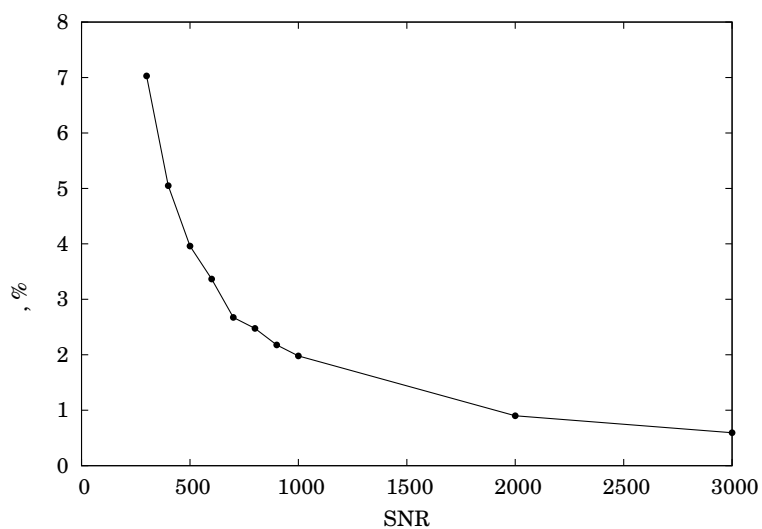


Рисунок 6.23 — Относительная ошибка определения оптической толщины облака τ_1 как функция SNR.

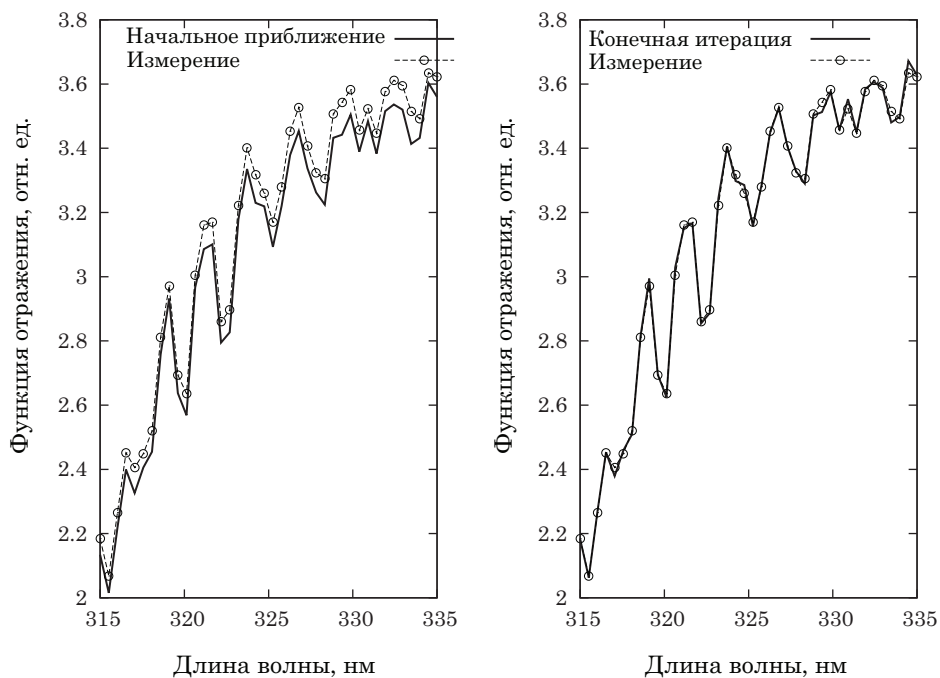


Рисунок 6.24 — Спектр $\mathbf{F}(\tau_{1i})$, соответствующий начальному приближению, синтетическое измерение \mathbf{y}^δ и спектр при восстановленном значении оптической толщины $\mathbf{F}(\tau_1)$ при SNR = 300.

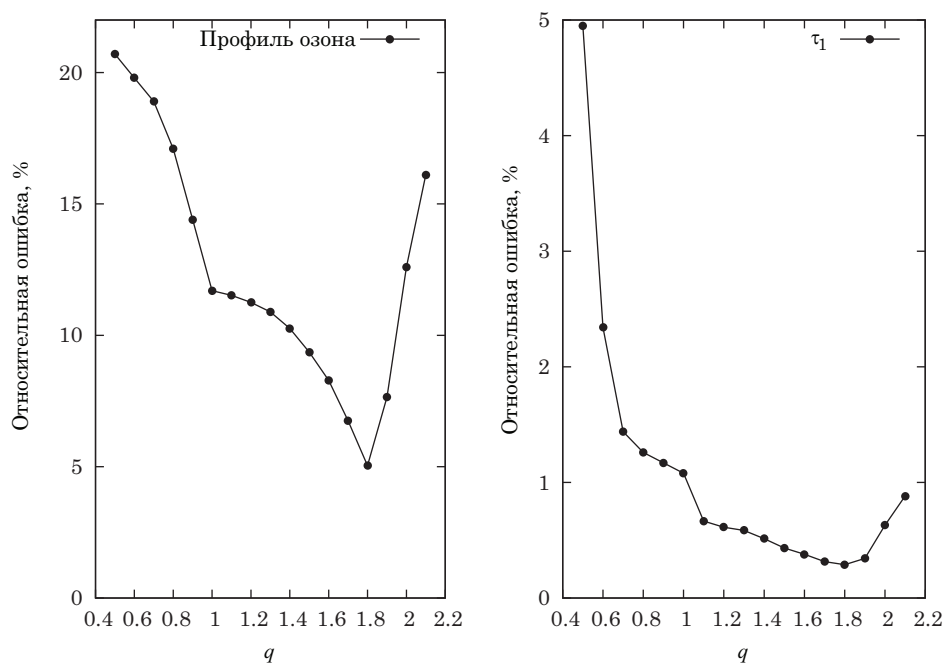


Рисунок 6.25 — Относительные ошибки восстановления профиля озона и оптической толщины облака при различных значениях параметра регуляризации $\alpha = \sigma^q$.

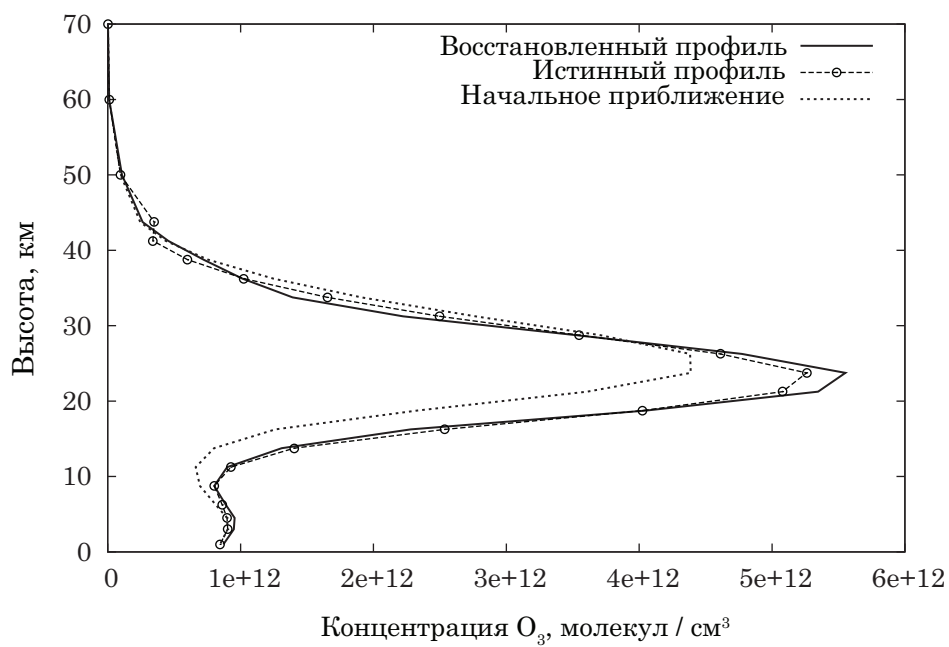


Рисунок 6.26 — Восстановленный профиль, точное решение и начальное приближение профиля озона.

озона из климатологической базы. На рисунке 6.25 показаны относительные ошибки восстановления профиля озона и оптической толщины как функции регуляризационного параметра $\alpha = \sigma^q$. Ошибка для профиля озона достигает минимума 5% при $q = 1.8$, а ошибка для оптической толщины менее 1 % практически на всем рассматриваемом диапазоне q . Интересно отметить, что при $q = 1.8$, ошибка для оптической толщины также достигает минимума. Восстановление профиля, в отличие от восстановления оптической толщины, сильно зависит от регуляризационного параметра. На рисунке 6.26 показаны восстановленный профиль, точное решение и начальное приближение профиля озона для $\alpha = \sigma^{1.8}$. Можно видеть, что восстановленный профиль адекватно описывает «истинный» профиль и в стратосфере, и в тропосфере (ниже 12 км). Преимущество модели заключается в высокой скорости счета, так как не требуется проводить расчет в полосе О2А. Однако определение параметров облака из полосы Хюггинса не устойчиво относительно альбедо поверхности и аэрозоля. Варьирование альбедо в диапазоне 10 % может привести к ошибке восстановления оптической толщины облака до 30 % при наблюдении в надир. Поэтому описанную модель рекомендуется использовать в тех случаях, когда свойства поверхности хорошо известны. Вторым недостатком модели заключается в итерационной процедуре, которая при оптической толщине облака меньше 5 может расходиться. Поэтому модель рекомендуется использовать на получения первого приближения для параметров озонового слоя и оптической толщины облака, а затем использовать обе полосы (315–335 нм и 758 – 772 нм).

6.4.3 Определение параметров облака

На следующем численном примере мы проанализируем эффективность методов нелинейной оптимизации, описанных в секции 6.1. Рассматривается задача восстановления оптической толщины облака и положения верхней границы облака по спектру О2А полосы (755 – 770 нм), соответствующей спектральному разрешению GOME-2. Спектр моделируется с помощью стохастической модели первого порядка. Для ускорения расчета используется метод k -распределения. Алгоритм восстановления использует интегральную модель (6.2). Если иное не указано, то параметры расчета здесь и далее следующие: $\theta_{\odot} = 60^\circ$, $\theta = 30^\circ$, $A = 0.2$ и $\bar{f} = 0.5$. Для облака используется модель «stratus continental» из климатологической базы ОРАС. К сигналу добавляется гауссовый шум с $SNR = 1000$. Параметр регуляризации выбирается в виде $\alpha = \sigma^p$, где

$$\sigma = \frac{\|\bar{I}(\lambda)\|}{\sqrt{m}SNR} \approx 2.4 \cdot 10^{-6} \quad (6.25)$$

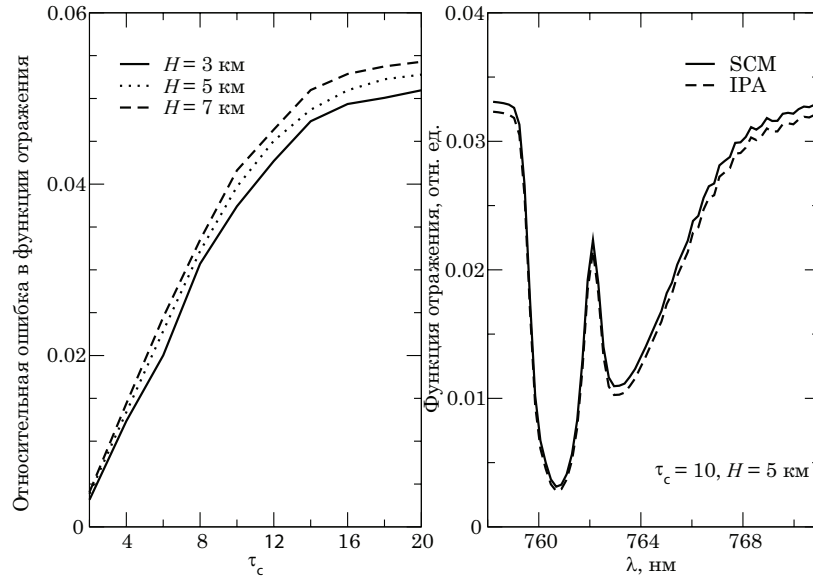


Рисунок 6.27 — Относительная ошибка приближения независимых пикселей при расчете яркости (слева), а также спектры, рассчитанные с помощью стохастической модели (SCM) и приближения независимых пикселей (IPA) (справа).

– среднеквадратичное отклонение и $m = 62$ – число спектральных точек.

Оценим ошибку приближения независимых пикселей на основе стохастической модели в определении яркости и оптической толщины облака. На рисунке 6.27 показана средняя по спектральному интервалу относительная ошибка яркости для приближения независимых пикселей. Ошибка растет с увеличением τ_c и H и достигает 5%. Заметим, что эта ошибка зависит от длины волны и может быть посчитана на основе стохастической модели.

На рисунке 6.28 показана относительная ошибка в определении оптической толщины облака. Верхняя граница облака $H = 4$ км. Истинные значения $\tau_c = 4.0$ и $\tau_c = 8.0$. Синтетические спектры рассчитаны с помощью стохастической модели, но определение оптической толщины выполнено в модели независимых пикселей с помощью метода Гаусса-Ньютона. При $\tau_c = 4$ кривая имеет глобальный минимум 0.06. При $\tau_c = 8$ и $\tau_{c0} < \tau_c$ возможно получить ошибку $2 \cdot 10^{-3}$, если выбран оптимальный параметр регуляризации α_{opt} . При $\tau_{c0} > \tau_c$ ошибка не меньше 0.2. Отметим, что результат $\alpha_{\text{opt}}(\tau_c = 4.0) < \alpha_{\text{opt}}(\tau_c = 8.0)$ согласуется с рисунком 6.27. Таким образом, на результат решения обратной задачи с помощью приближения независимых пикселей сильное влияние оказывает неоднородность облака.

Применим метод Гаусса-Ньютона к спектрам, посчитанным в рамках стохастической модели. Для решения обратной задачи также будем использовать стохастическую модель. Результаты восстановления оптической толщины облака τ_c и верхней границы облака H показаны на рисунке 6.29. Истинное значение τ_c меняется в диапазоне от 4 до 20 с шагом 2, и

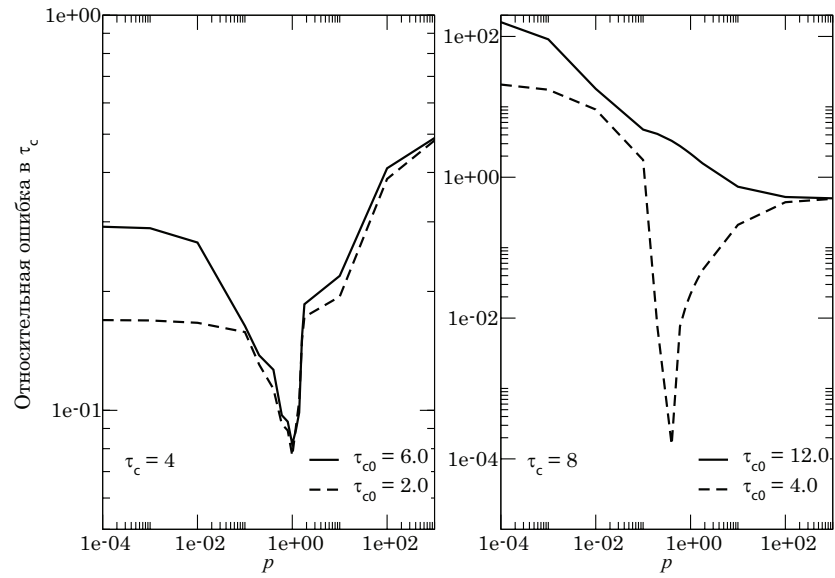


Рисунок 6.28 — Относительная ошибка в оптической толщине облака. Слева: истинное значение $\tau_c = 4.0$, начальные приближения $\tau_{c0} = 6.0$ и $\tau_{c0} = 2.0$. Справа: $\tau_c = 8.0$, $\tau_{c0} = 12.0$ и $\tau_{c0} = 4.0$.

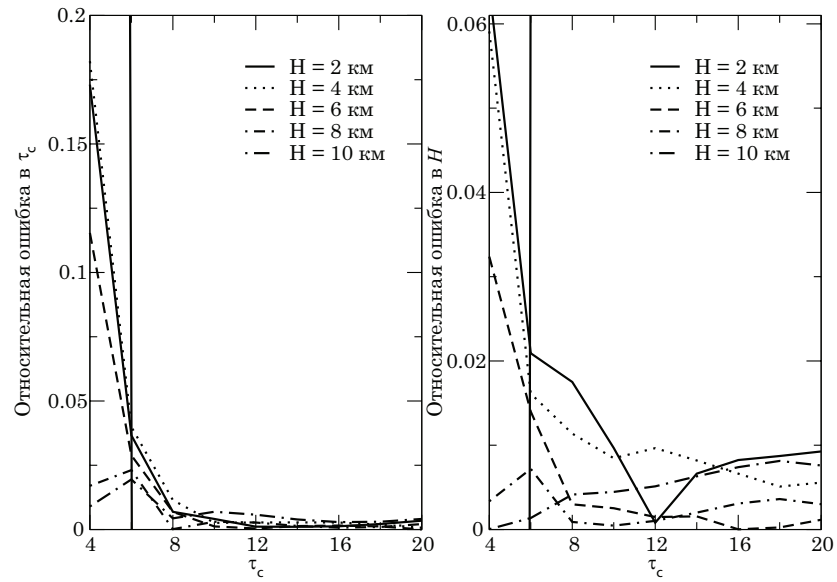


Рисунок 6.29 — Ошибка восстановления оптической толщины облака и верхней границы облака.

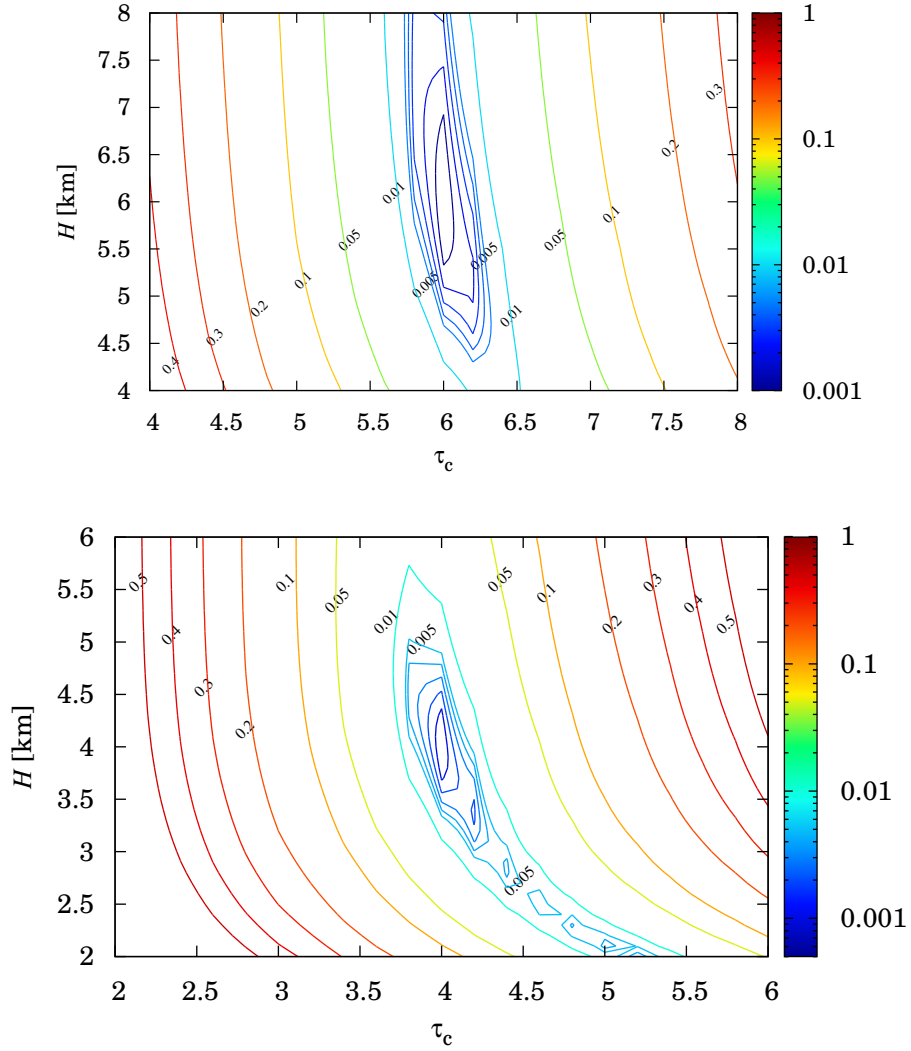


Рисунок 6.30 — Функция Тихонова при $(\tau_c = 6, H = 6 \text{ км})$ (сверху) и $(\tau_c = 4, H = 4 \text{ км})$ (снизу).

истинное значение H меняется в диапазоне от 2 км до 10 км с шагом 2 км. Параметр регуляризации равен $\alpha = 10^{-6}$ ($p \approx 0.9$). При $\tau_c \geq 6$ и $H \geq 6$, относительная ошибка меньше 0.03 для τ_c и меньше 0.02 для H . В области $S_0 = \{(\tau_c, H) | 2 \leq \tau_c \leq 6, 2 \leq H \leq 6 \text{ (км)}\}$ ошибки существенно больше. Причина больших ошибок заключается в том, что метод Гаусса-Ньютона не находит глобальный минимум функции Тихонова в S_0 . На рисунке 6.30 показана функция Тихонова для случаев $(\tau_c = 6, H = 6 \text{ км})$ и $(\tau_c = 4, H = 4 \text{ км})$. В первом случае присутствует только один минимум, а во втором случае присутствует несколько локальных минимумов.

В качестве альтернативы методу Гаусса-Ньютона рассмотрены итерационный алгоритм ILS в сочетании с L-BFGS методом, генетический алгоритм и алгоритм имитации отжига. Результаты показаны в таблицах 6.7, 6.8 и 6.9, соответственно. Относительные ошибки вос-

Таблица 6.7 — Относительные ошибки восстановления оптической толщины и верхней границы облака с помощью итерационного алгоритма ILS в сочетании с L-BFGS методом.

Оптическая толщина облака		Верхняя граница облака [км]				
		2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
2.0	Ошибка τ_c	0.10E-04	0.10E-04	0.28E-02	0.17E-02	0.10E-04
3.0		0.46E-03	0.19E-03	0.75E-04	0.68E-03	0.48E-03
4.0		0.53E-03	0.18E-03	0.39E-02	0.52E-04	0.50E-03
5.0		0.22E-03	0.11E-02	0.14E-02	0.49E-04	0.45E-03
6.0		0.10E-04	0.10E-04	0.10E-04	0.10E-04	0.10E-04
2.0	Ошибка H	0.10E-04	0.34E-03	0.14E-02	0.11E-02	0.15E-04
3.0		0.10E-04	0.80E-04	0.21E-03	0.28E-03	0.44E-04
4.0		0.10E-04	0.85E-04	0.15E-02	0.20E-04	0.10E-04
5.0		0.10E-04	0.18E-03	0.34E-03	0.72E-04	0.25E-04
6.0		0.10E-04	0.43E-03	0.67E-04	0.33E-04	0.10E-04

Таблица 6.8 — Относительные ошибки восстановления оптической толщины и верхней границы облака с помощью генетического алгоритма.

Оптическая толщина облака		Верхняя граница облака [км]				
		2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
2.0	Ошибка τ_c	0.29E-03	0.39E-03	0.80E-02	0.75E-04	0.11E-01
3.0		0.62E-03	0.81E-03	0.29E-02	0.62E-03	0.25E-03
4.0		0.10E-04	0.85E-04	0.14E-02	0.20E-02	0.28E-02
5.0		0.61E-02	0.86E-02	0.79E-02	0.38E-02	0.55E-02
6.0		0.51E-03	0.40E-03	0.21E-03	0.41E-04	0.22E-03
2.0	Ошибка H	0.1400E-03	0.20E-03	0.46E-02	0.74E-04	0.57E-02
3.0		0.2400E-03	0.28E-03	0.13E-02	0.42E-03	1.00E-04
4.0		0.5500E-04	0.40E-04	0.55E-03	0.77E-03	0.91E-03
5.0		0.2430E-02	0.32E-02	0.27E-02	0.11E-02	0.17E-02
6.0		0.4800E-03	0.24E-03	0.50E-04	0.32E-04	0.40E-04

становления τ_c и H не превышают 0.004 и 0.002 для итерационного алгоритма, 0.012 и 0.006 для генетического алгоритма, и 0.04 и 0.03 для алгоритма имитации отжига, соответственно. Самым точным оказался метод ILS. Отметим, что метод ILS благодаря определению оптимального направления к следующей итерации с помощью матрицы Якоби требует около 100 вызовов прямой модели, а генетический алгоритм — 8000.

Несмотря на вычислительную эффективность методов прямого поиска, по скорости сходимости они уступают методам локальной оптимизации при условии, что последние сходятся. Для того, чтобы найти компромисс между точностью и скоростью счета, мы объединим методы прямого поиска и градиентные методы. Определим область, в которой метод Гаусса-

Таблица 6.9 — Относительные ошибки восстановления оптической толщины и верхней границы облака с помощью алгоритма имитации отжига.

Оптическая толщина облака		Верхняя граница облака [км]				
		2.0	3.0	4.0	5.0	6.0
2.0	Ошибка τ_c	0.84E-02	0.12E-01	0.38E-01	0.92E-02	0.82E-02
3.0		0.56E-02	0.56E-02	0.89E-02	0.99E-02	0.33E-02
4.0		0.21E-02	0.71E-02	0.60E-02	0.42E-02	0.50E-02
5.0		0.19E-01	0.70E-02	0.57E-02	0.11E-01	0.28E-01
6.0		0.14E-02	0.36E-02	0.58E-02	0.58E-02	0.64E-02
2.0	Ошибка H	0.96E-03	0.29E-02	0.22E-01	0.40E-02	0.44E-02
3.0		0.96E-03	0.64E-03	0.41E-02	0.46E-02	0.23E-02
4.0		0.14E-02	0.24E-02	0.22E-02	0.38E-03	0.12E-02
5.0		0.85E-02	0.30E-02	0.18E-02	0.46E-02	0.97E-02
6.0		0.14E-02	0.34E-02	0.42E-02	0.33E-02	0.57E-03

Ньютона расходится:

$$S_0 = \{(\tau_c, H) | 2 \leq \tau_c \leq 8, 2 \leq H \leq 6 \text{ (км)}\}.$$

Комбинированный алгоритм работает следующим образом. Используется один из методов локальной оптимизации. Если на текущей итерации полученное приближение попадает в область S_0 , запускается используется метод глобальной оптимизации и выбирается приближение с наименьшей невязкой.

6.4.4 Точность модели независимых пикселей при определении общего содержания и профиля озона

Рассмотрим процедуру восстановления озона с точки зрения возможности дифференциальной модели (6.3), основанной на приближении независимых пикселей, уменьшать влияние неоднородного облака и нивелировать связанные с неоднородностью облака ошибки. Для обращения используется дифференциальная модель в приближении независимых пикселей и метод Гаусса-Ньютона. «Истинный» профиль озона взят из климатологической базы McLinden et al. [252]. В качестве начального приближения для профиля озона взят сдвинутый на 3 км вверх истинный профиль с весом 0.8. Параметры расчета: $\theta_\odot = 60^\circ$, $\theta = 30^\circ$, $A = 0.2$ и $\bar{f} = 0.5$. Общее содержание озона и профиль озона определяются по спектрам в интервалах 325 – 335 нм и 290 – 340 нм, соответственно.

Проанализируем влияние дифференциальной модели. На рисунке 6.31 показаны спектры, рассчитанные в приближении независимых пикселей и стохастической модели первого

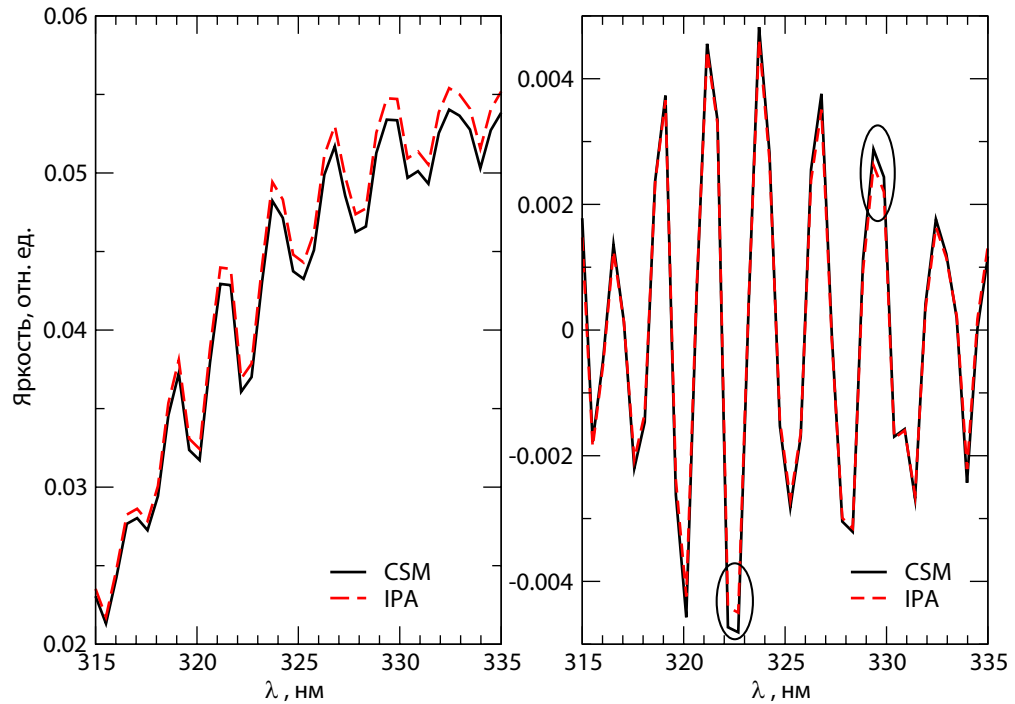


Рисунок 6.31 — Спектры в полосе Хюггинса, рассчитанные с помощью модели независимых пикселей (IPA) и стохастической модели первого порядка (CSM). Справа показаны спектры в дифференциальной модели. Параметры облака: $\tau_c = 10.0$, $H = 5$ км.

порядка. Переход от интегральной модели к дифференциальной существенно снижает расхождение между моделями. Максимальное расхождение наблюдается в окрестности 323 нм и 330 нм.

Относительная ошибка определения общего содержания озона и средняя по высоте ошибка в профиле озона как функция параметра регуляризации показаны на рисунке 6.32. Восстановление озона и профиля озона проведено из трех спектров, рассчитанных (1) с помощью приближения независимых пикселей при $\tau_c = 6.0$, (2) с помощью стохастической модели при $\tau_c = 6.0$, и (3) с помощью стохастической модели при $\tau_c = 4.0$. Обратная задача решается при предположении $\tau_c = 6.0$. Верхняя граница облака считается известной: $H = 4$ км. К спектрам добавлен шум, соответствующий $\text{SNR} = 1000$. Обратная задача решается в приближении независимых пикселей с помощью метода Гаусса-Ньютона. В первом случае присутствует ошибка, обусловленная только шумом в спектре. Во втором случае присутствуют как шум, так и ошибка прямого моделирования, связанная с пренебрежением неоднородности облака (IPA). В третьем случае кроме перечисленных ошибок присутствует ошибка в оптической толщине облака. Результаты расчета следующие:

1. Для общего содержания озона минимальные относительные ошибки равны 0.007, 0.010 и 0.016 для рассмотренных случаев, соответственно. Интервал изменения показателя p ,

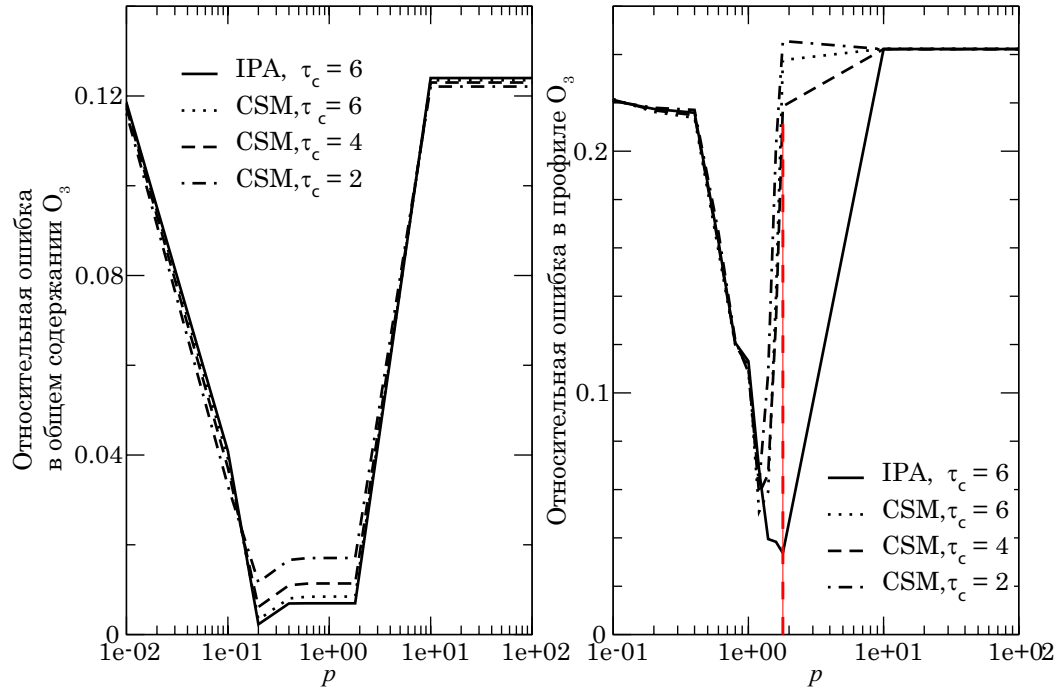


Рисунок 6.32 — Относительные ошибки определения общего содержания озона (слева) и профиля озона (справа). Спектры рассчитаны с помощью приближения независимых пикселей (IPA) и стохастической модели (CSM).

соответствующего оптимальному значению параметра регуляризации $\alpha_{\text{opt}} = \sigma^p$, достаточно большой: $0.2 \leq p \leq 2.0$.

2. Для профиля озона минимальные относительные ошибки равны 0.033, 0.051 и 0.060, соответственно. Оптимальное значение параметра регуляризации соответствует $p = 2.0$ в первом случае и $p = 1.0$ во втором и третьем случаях. Таким образом, α_{opt} увеличивается с ростом ошибки и он должен быть точно рассчитан (интервал p , на котором достигается минимум ошибки, узкий).

Полученные результаты говорят о том, что дифференциальная модель, основанная на приближении независимых пикселей, лишь частично убирает влияние неоднородного облака. Ошибки в общем содержании озона остаются малыми, в то время как ошибки при определении профиля озона могут быть существенными.

Важное практическое приложение стохастической модели заключается в методе выбора оптимального параметра регуляризации. Как указано в [120], при использовании регуляризации Тихонова выбор оптимального параметра регуляризации основан на анализе кривых ошибок, показанных на рисунке 6.32. Прямая и обратная задачи решаются с помощью разных моделей (в нашем случае это IPA и стохастическая модель) при случайном варьировании некоторых параметров одной из моделей (в нашем случае это оптическая толщина

облака). Для каждого случая ищется параметр регуляризации, минимизирующий невязку между восстановленным и «истинным» параметром. При определении общего содержания озона минимум невязки достигается на достаточно широком интервале значений показателя p ($0.2 < p < 2$). Обе модели (ИРА и стохастическая модель) предсказывают оптимальные значения p . При определении профиля озона значение p должно быть известно точно, так как кривые ошибки имеют узкие минимумы. Минимум ошибки при использовании модели ИРА достигается при $p = 1.8$. Однако использования этого значения приведет к 0.23 (см. красную прямую на рисунке 6.32). При использовании более реалистичной модели (в нашем случае, стохастической) для описания неоднородного облака, оптимальное значение $p = 1.2$ и ошибка 0.05.

Отсюда можно сделать следующие выводы:

1. использование стохастической модели вдвое уменьшает ошибку в восстановлении общего содержания озона (с 0.051 до 0.033),
2. использование стохастической модели для априорного выбора параметра регуляризации почти в 4 раза сокращает ошибку при определении профиля озона (с 0.2 до 0.05),
3. знание истинного значения оптической толщины облака уменьшают ошибку восстановления профиля на 1 %.

Результаты Главы 6

1. Предложенный одномерный алгоритм решения уравнения переноса был применен для интерпретации спектров GOME-2 для определения общего содержания озона в интегральной модели. Относительное расхождение между предложенным алгоритмом и алгоритмом GDP 4 не превышает 0.5%. При этом скорость счета нового кода выше в 280 раз по сравнению с классической реализацией.
2. Построена регрессионная модель для определения высоты вулканических шлейфов. Модель включает линейные и нелинейные регрессионные модели. Линейные модели построены на алгоритмах снижения размерности спектральных данных (PCR, PLSR), что улучшает стабильность алгоритма. Нелинейные зависимости учитываются с помощью искусственной нейронной сети. Показано, что комбинированное использование линейных и нелинейных моделей наиболее эффективно с точки зрения точности получаемой модели и скорости обучения нейронной сети.

3. Описанный алгоритм определения высоты диоксида серы был применен к измерениям GOME-2 над очагами вулканической активности. Получено хорошее совпадение с результатами альтернативных методов.
4. На базе стохастической модели и модели внутреннего смешивания исследован алгоритм совместного определения оптической толщины облака и профиля озона. Основное преимущество алгоритма заключается в том, что определяемые параметры облака являются совместимыми с используемой моделью переноса излучения, что повышает устойчивость решения. Однако при использовании только полосы Хюггинса модель не устойчива относительно альбедо поверхности и аэрозолей.
5. Предложен метод определения параметров облака в стохастической модели. Восстанавливаемыми параметрами являются оптическая толщина и положение верхней границы облака. Для сходимости итерационного решения обратной задачи используются метод локальной оптимизации в сочетании с методами глобальной оптимизации. Процедура локальной оптимизации основана на методе Гаусса-Ньютона, а процедура глобальной оптимизации использует или L-BFGS метод, или методы прямого поиска, такие как генетический алгоритм и алгоритм имитации отжига.
6. Было показано, что дифференциальная модель, основанная на приближении независимых пикселей, лишь частично убирает влияние неоднородного облака. Ошибки в общем содержании озона остаются малыми, в то время как ошибки при определении профиля озона могут быть существенными. Численные расчеты свидетельствуют о том, что точность существующих алгоритмов может быть увеличена как минимум вдвое, если определять оптимальный параметр регуляризации и параметры облака, используя стохастическую модель.

ГЛАВА 7. Использование методов и подходов теории оптического переноса в решении обратных задач электронной спектроскопии

В этой главе мы рассмотрим применение алгоритмов расчета оптического переноса для решения обратных задач электронной спектроскопии. Дистанционное зондирование атмосферы Земли и спектроскопия твердого тела методологически схожи. В обоих случаях присутствует источник (солнце или электронная пушка) с известными спектральными характеристиками, а свойства исследуемой среды определяются по спектру рассеянного излучения (потока электронов). Эта аналогия сохраняется и на уровне математического аппарата. Поэтому имеет смысл рассматривать перенос частиц в твердом теле и перенос излучения в мутных средах совместно [401]. Согласно гипотезе Ферми, рассеяние электрона в твердом теле может быть упругим и неупругим. Первое (elastic scattering) сопровождается изменением направления движения на угол θ , а второе (inelastic scattering) приводит к потере энергии Δ . Эти процессы описываются сечениями рассеяния σ_{el} и σ_{in} , соответственно. Также вводятся дифференциальные сечения $\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} = \sigma_{\text{el}} x(\theta)$ и $\frac{d\sigma_{\text{in}}}{d\Delta} = \sigma_{\text{in}} D(\Delta)$, где $x(\theta)$ – индикатриса рассеяния, $D(\Delta)$ – нормированное дифференциальное сечение неупругого рассеяния ($\int_0^{E_0} s(\Delta) d\Delta = 1$). Величины σ_{el} , $x(\theta)$, σ_{in} и $D(\Delta)$ полностью описывают перенос электронов зондирующего пучка в твердом теле. Характерные длины пробегов определяются как

$$l_{\text{el}} = \frac{1}{n\sigma_{\text{el}}}, \quad l_{\text{in}} = \frac{1}{n\sigma_{\text{in}}}, \quad l_{\text{t}} = \frac{1}{n(\sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{in}})} = \frac{1}{n\sigma_{\text{t}}}, \quad (7.1)$$

где l_{el} – среднее расстояние между двумя последовательными упругими рассеяниями, l_{in} – среднее расстояние между двумя последовательными неупругими рассеяниями, l_{t} – среднее расстояние между двумя любыми рассеяниями, n – объемная концентрация рассеивателей, $\sigma_{\text{t}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{in}}$ – полное сечение рассеяния. Можно определить параметры, эквивалентные тем, что используются в оптике:

$$\omega = \frac{\sigma_{\text{el}}}{\sigma_{\text{t}}}, \quad \tau = \frac{z}{l_{\text{t}}}, \quad (7.2)$$

где ω – альбеда однократного рассеяния, τ – оптическая толщина слоя с геометрической толщиной z или безразмерная координата, выраженная в оптических толщинах. Все указанные параметры зависят от начальной энергии электрона пучка E_0 . Возможность многократного неупругого рассеяния качественно отличает задачу о переносе электронов от задачи о переносе излучения.

Для нахождения σ_{e1} и $x(\theta)$ требуется решить задачу о взаимодействии двух тел с учетом квантово-механических эффектов, для чего существуют хорошо апробированные алгоритмы, проверенные экспериментально. Для теоретического определения σ_{in} и $s(\Delta)$ требуется решить задачу о взаимодействии электрона пучка с электронной подсистемой твердого тела, что является более трудоемкой задачей. Поэтому перспективным методом определения параметров неупругого рассеяния является их восстановление из спектров энергетических потерь в диапазоне 0-100 эВ¹.

Далее рассмотрены две задачи: (1) интерпретация угловых распределений упруго отраженных электронов и (2) анализ спектров характеристических потерь энергии (reflected electron energy loss spectroscopy – REELS). Первая задача связана со спектроскопией упруго отраженных электронов (elastic peak electron spectroscopy – EPES), вышедшей на принципиально новый уровень в связи с тем, что стало возможным экспериментально разрешать пики электронов, рассеянных на ядрах разных химических элементов. Вторая задача интересна тем, что позволяет получать информацию о диэлектрических свойствах твердотельных мишеней. Обе задачи имеют как прямую формулировку (быстрое и точное моделирование измеряемого сигнала), так и обратную (определение параметров неупругого рассеяния и компонентного состава). Для прямой задачи часто используются полуэмпирические модели (например, транспортное приближение), ошибка которых может достигать 50 %, или метод Монте-Карло, скорость счета которого на несколько

порядков ниже скорости аналитических методов. Из-за плохой обусловленности обратных задач электронной спектроскопии, их решение основано на процедуре подбора на основе многократного решения прямой задачи. Однако «ручной» подбор параметров имеет несколько недостатков. Во-первых, в случае задачи со многими переменными метод может потребовать много итераций, особенно если задача имеет нелинейные зависимости. Во-вторых, результат решения зависит от навыка или интуиции человека. При использовании спектрометрических методов для диагностики реальных производственных процессов требуются автономные алгоритмы обработки сигнала, в частности, для решения обратных задач. Целью

¹ 1 эВ $\approx 1.602 \cdot 10^{-19}$ Дж.

этой главы является применение алгоритмов, развитых в данной диссертации для решения обратных задач дистанционного зондирования, для решения обратных задач электронной спектроскопии. Параметры для расчетов были взяты из следующих источников: σ_{e1} и $\frac{d\sigma_{e1}}{d\Omega}$ из [402], l_{in} рассчитывалась по формуле TPR-2М [403]. Представленные ниже расчеты на основе метода Монте-Карло выполнены с помощью кода EPESWIN [404].

7.1 Обработка измерений упруго отраженных электронов

Известно, что из-за граничных эффектов частота плазмонов у поверхности твердого тела отличается от частоты плазмонов в объеме мишени. В работе [405] показано, что длина неупругого пробега в приповерхностных слоях твердого тела может отличаться от значений, предсказанных с помощью формулы TPR-2М. Возможное объяснение последнего факта заключается в том, что электрон пучка, еще не попав в мишень, может потерять энергию на возбуждение плазмонов, при этом рассеяться упруго он не может, так как поле ядер экранировано электронным газом. Поэтому ожидается, что ω будет меньше в приповерхностных слоях, чем «в глубине» мишени. Соответствующая модель показана на рисунке 7.1. Восстановить $\omega(\tau)$ можно из угловых распределений упруго отраженных электронов $I(\theta, \varphi)$. Для этого система разбивается на некоторое число слоев, которые предполагаются однородными. Количество слоев, необходимое для корректной интерпретации спектров, зависит от точности эксперимента и может быть от одного слоя [13] до трех (при сегодняшней точности эксперимента). В последнем случае помимо основного объема мишени (bulk) выделяют «поверхностный слой» (surface) и «промежуточный слой» (intermediate). Их толщины и альбедо соответственно равны τ_s , ω_s и τ_i , ω_i .

Описание процесса переноса упруго рассеянных электронов полностью эквивалентно описанию переноса излучения в мутных средах и строится на уравнении переноса излучения 2.94, связывающим $\{\tau_k, \omega_k\}_{k=s,i,b}$ с $I(\theta, \varphi)$. В [2A] показано, что радиационные коды DISORT и MDOM могут быть использованы для описания угловых распределений упруго отраженных электронов. В [406] они использовались для апробации аналитических решений, полученных на основе малоуглового приближения. В [10A] восстановление $\{\tau_k, \omega_k\}_{k=s,i}$ производилось посредством процедуры подбора. Имея в распоряжении модель LMDOM (линеаризованную версию MDOM), описанную в Главе 2, можно решить обратную задачу с помощью методов локальной оптимизации, использующих для расчета очередной итерации матрицу Якоби прямой модели $\left[\frac{\partial I_n}{\partial \xi_p} \right]_{p=1, \dots, 4}^{n=1, \dots, N}$, где $\xi = \begin{bmatrix} \tau_s & \omega_s & \tau_i & \omega_i \end{bmatrix}$, N – число измерений (в рассматри-

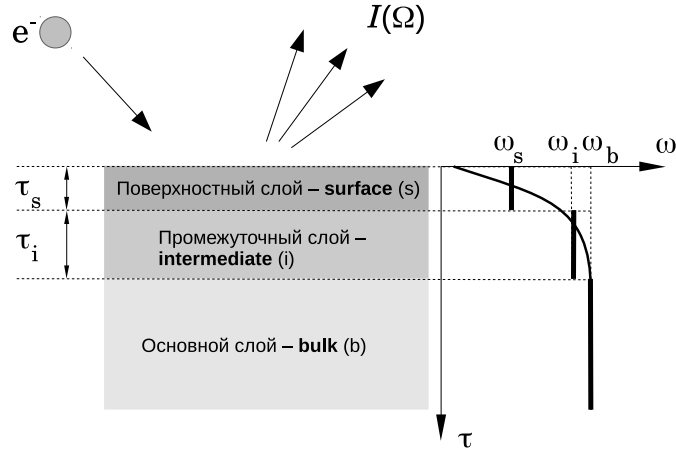


Рисунок 7.1 — Иллюстрация к модели упругого отражения от мишени с неоднородным законом потерь энергии по глубине. ω_b — альбеда однократного рассеяния в глубине мишени (в слое «bulk»), ω_i — в промежуточном слое, ω_s — в поверхностном слое.

ваемом случае, число точек в угловом распределении). Заметим, что для рассеяния электронов характерна высокая анизотропия рассеяния (при энергии, превышающей 10 кэВ, сечение рассеяния на ядрах легких элементов близко к резерфордскому). Алгоритм LMDOM позволяет получать искомое решение без усечения индикатрис рассеяния за счет аналитического выделения анизотропной части решения.

Для решения обратной задачи надо знать регуляризационный параметр α и регуляризационную матрицу \mathbf{L} . Для их нахождения были использованы расчетные угловые распределения, полученные при известных исходных параметрах прямой модели. Далее, к угловым распределениям был добавлен «гауссовый» шум в размере 2% от среднего значения углового распределения. Параметр α был выбран таким, чтобы «восстановленные» параметры были бы максимально близки к исходным. Относительно \mathbf{L} можно сделать следующие замечания:

1. Если мы не предполагаем зависимость между восстанавливаемыми параметрами (например, гладкость восстанавливаемой функции), то \mathbf{L} имеет диагональный вид.
2. Значения диагональных элементов показывают, сколь «быстро» должен изменяться тот или иной параметр в процессе итераций.

Были рассмотрены угловые распределения для трех моделей: полубесконечный слой Ag, $E_0 = 1000$ эВ; слой Au на подложке Ni, $E_0 = 2000$ эВ; слой Au на подложке Si, $E_0 = 8000$ эВ. При $\alpha = 10^{-8}$ погрешность восстановления τ_s в среднем 0.2%, погрешность восстановления ω_s — 0.5 %. \mathbf{L} имеет диагональный вид, причем точность инверсии выше, если элементы \mathbf{L} , относящиеся к альбеде, в два раза больше тех, что относятся к оптическим толщинам.

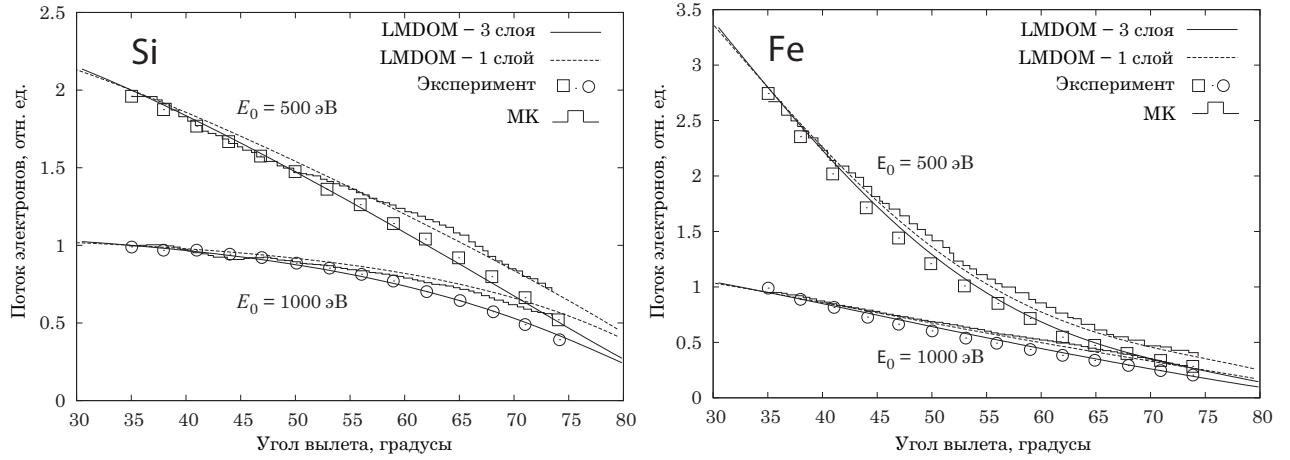


Рисунок 7.2 — Угловые распределения электронов, упруго отраженных от мишеней Si и Fe. Расчет выполнен в трехслойной модели. Расчет методом Монте-Карло выполнен в однослойной модели.

Проведем интерпретацию экспериментальных данных из [407] на основе кода LMDOM и метода Гаусса-Ньютона. Измерения проводились при энергиях зондирующего пучка 200 эВ, 500 эВ и 1000 эВ при нормальном угле зондирования. Угловые распределения измерялись в диапазоне углов 35° – 74° . На рисунке 7.2 показаны результаты обработки угловых распределений электронов, упруго отраженных от мишеней Si и Fe. Интерпретация производится в трехслойной модели. Восстанавливаемый вектор имеет вид $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \tau_s & \omega_s & \tau_i & \omega_i \end{bmatrix}^T$. В качестве начального приближения были взяты параметры слоя bulk для ω_s и ω_i и $\tau_{s,i} = 0.5l_{in}$. Итерационная процедура сходится за 5 итераций, при этом время счета не превосходит 1 секунды с учетом времени считывания данных (сходимость достигается при 64 дискретных ординатах). На представленных графиках видно, что угловые распределения описываются точнее в рамках трехслойной модели. Восстановленные параметры несколько отличаются от параметров, определенных методом подбора, хотя качественно («на глаз») расчетные угловые распределения очень похожи. Восстановленные параметры приведены в таблице 7.1. Они качественно подтверждают гипотезу о меньших значениях альбедо однократного рассеяния в приповерхностных слоях твердого тела.

Далее рассмотрим угловые распределения для тяжелых элементов (серебро и золото), которые интерпретируются в однослойной модели. В качестве искомого вектора возьмем $\mathbf{x} = [\omega_b, x_1, x_2]^T$, где x_1 и x_2 – первый и второй коэффициенты разложения индикатрисы рассеяния ($x_0 = 1$), соответственно. Результат интерпретации представлен на рисунке 7.3. Восстановленные значения ω_b , x_1 и x_2 отличаются от табличных менее 1 %, что позволяет сделать вывод об устойчивости решения обратной задачи.

Таблица 7.1 — Восстановленные параметры по угловым распределениям упруго отраженных электронов

Слой	ω Si	τ Si	ω Fe	τ Fe
$E_0 = 500$ эВ				
Surface	$\omega_b/2.4$	$l_{in}/4.9$	$\omega_b/2.02$	$l_{in}/5.1$
Intermediate	$\omega_b/1.21$	$l_{in}/3.2$	$\omega_b/1.45$	$l_{in}/3.8$
Bulk	0.56	∞	0.68	∞
$E_0 = 1000$ эВ				
Surface	$\omega_b/2.38 [\omega_b/2.5]$	$l_{in}/4.3 [l_{in}/5]$	$\omega_b/2.2 [\omega_b/2]$	$l_{in}/5.0 [l_{in}/5]$
Intermediate	$\omega_b/1.3 [\omega_b/1.2]$	$l_{in}/3.0 [l_{in}/3]$	$\omega_b/1.5 [\omega_b/1.4]$	$l_{in}/4.1 [l_{in}/4]$
Bulk	0.57	∞	0.71	∞

В скобках [...] указаны значения, полученные методом подбора и приведенные в [A10] и в [406].

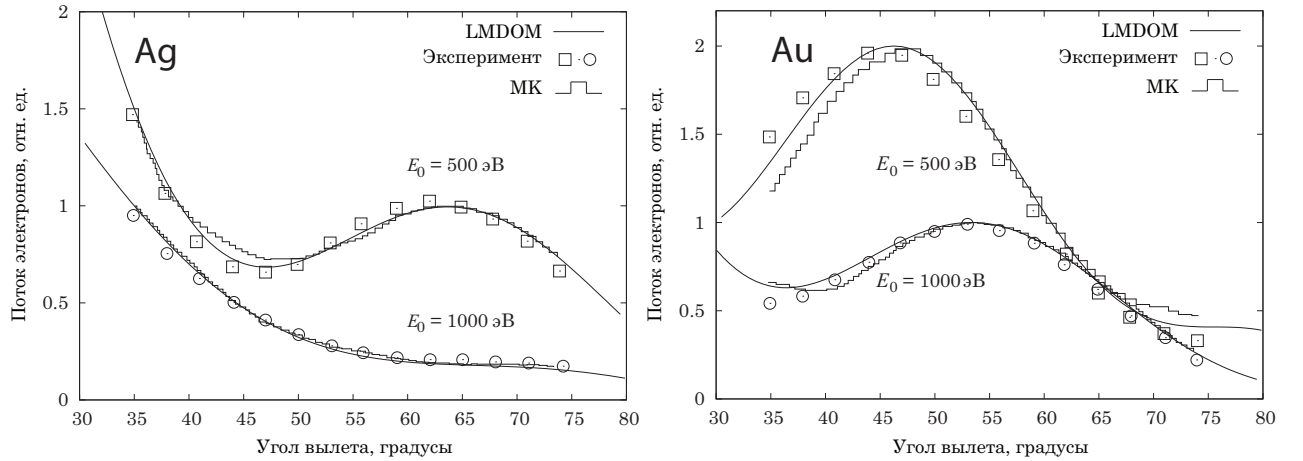


Рисунок 7.3 — Угловые распределения электронов, упруго отраженных от мишеней Ag и Au. Расчет выполнен в однослойной модели.

Таким образом, линеаризованные модели, созданные для решения обратных задач дистанционного зондирования, были апробированы на базе электронной спектроскопии. Ранее прямые модели, такие как MDOM и DISORT, успешно применялись для расчета потока упруго отраженных электронов, а соответствующая обратная задача решалась методом подбора. Линеаризованная модель позволяет определить оптимальное направление дальнейшего поиска следующего приближения, а также найти параметры, которые сильнее всего влияют на модель (этим параметрам будут соответствовать наибольшие значения частных производных). Также по величине производной можно судить о том, насколько эффективна та или иная методика для определения искомого параметра (чем производная больше, тем чувствительней измеряемый спектр к этому параметру) и, наоборот, как неопределенность в каком-либо параметре системы влияет на результат. Таким образом, линеаризованная модель позволяет улучшить планирование эксперимента. Интересным дальнейшим шагом могла бы стать линеаризация алгоритмов расчета микропараметров (например, ELSEPA [402]) по аналогии с линеаризацией алгоритма расчета параметров рассеяния методами T-matrix и теории Ми [408].

7.2 Определение дифференциальных сечений неупругого рассеяния из спектров характеристических потерь энергии

7.2.1 Эффективный расчет спектров характеристических потерь энергии

Спектр характеристических потерь энергии $R(\Delta, \mu, \mu_0)$ формируется многократно неупруго рассеянными электронами. Процесс формирования спектра будем описывать на основе модели парциальных интенсивностей [28A]. Для l -той азимутальной гармоники R_l функции отражения имеем:

$$R_l(\Delta, \mu, \mu_0) = \sum_k \bar{x}_{in}^k(\Delta) R_l^{(k)}(\mu, \mu_0), \quad (7.3)$$

где $R_l^{(k)}$ – l -тая азимутальная гармоника интенсивности k -кратно неупруго рассеянных электронов, $\bar{x}_{in}^k(\Delta)$ – k -кратная свертка нормированного дифференциального сечения неупругого

рассеяния. По аналогии с подходом Чандрасекара, для $R_l^{(k)}$ получим уравнения методом инвариантного погружения:

$$k = 0:$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} R^{(0)}(\tau, \mu, \mu_0) + \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu_0} \right) R^{(0)}(\tau, \mu, \mu_0) = \lambda x_{el}^-(\mu_0, \mu) + \int_0^1 R^{(0)}(\tau, \mu_0, \mu') x_{el}^+(\mu', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} \\ + \int_0^1 x_{el}^+(\mu_0, \mu') R^{(0)}(\tau, \mu', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} + \int_0^1 \int_0^1 R^{(0)}(\tau, \mu_0, \mu') x_{el}^-(\mu', \mu'') R^{(0)}(\tau, \mu'', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} \frac{d\mu''}{\mu''), \end{aligned} \quad (7.4)$$

$$k \geq 1:$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} R^{(k)}(\tau, \mu, \mu_0) + \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu_0} \right) R^{(k)}(\tau, \mu, \mu_0) = (1 - \lambda) \left(\frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu_0} \right) R^{(k-1)} \quad (7.5)$$

$$\begin{aligned} + \lambda \int_0^1 R^{(k)}(\tau_n, \mu_0, \mu') x_{el}^+(\mu', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} + \lambda \int_0^1 x_{el}^+(\mu_0, \mu') R^{(k)}(\tau_n, \mu', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} \\ + \lambda \sum_{i=0}^k \int_0^1 \int_0^1 R^{(i)}(\tau, \mu_0, \mu') x_{el}^-(\mu', \mu'') R^{(k-i)}(\tau, \mu'', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} \frac{d\mu''}{\mu''}. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Уравнение (7.4) описывает упруго отраженные электроны, уравнение (7.6) записано для электронов, испытавших k случаев неупругого рассеяния. Дискретизация уравнений (7.4)-(7.6) проведена В.П.Афанасьевым и П.С.Каплей на основе замены интегральных членов гауссовой квадратурой с N узлами $\{\mu_i\}$ и весами $\{s_i\}$. В результате получим систему матричных уравнений:

$$\frac{\partial \mathbf{R}_0(\tau)}{\partial \tau} + \mathbf{A} \mathbf{R}_0(\tau) + \mathbf{R}_0(\tau) \mathbf{A}' = \mathbf{C} + \mathbf{R}_0(\tau) \mathbf{D} \mathbf{R}_0(\tau), \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{R}_k(\tau)}{\partial \tau} + \mathbf{H} \mathbf{R}_k(\tau) + \mathbf{R}_k(\tau) \mathbf{H}' = \mathbf{J}, \quad (7.8)$$

где

$$\mathbf{A} = \mathbf{m}^{-1} - \lambda \mathbf{x}^+ \mathbf{w}, \quad \mathbf{C} = \lambda \mathbf{x}^-, \quad \mathbf{D} = \lambda \mathbf{w} \mathbf{x}^- \mathbf{w},$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{m}^{-1} - \lambda \mathbf{x}^+ \mathbf{w} - \lambda \mathbf{R}_0(\tau) \mathbf{w} \mathbf{x}^- \mathbf{w},$$

$$\mathbf{J} = (1 - \lambda) \mathbf{m}^{-1} \mathbf{R}_{k-1}(\tau) + (1 - \lambda) \mathbf{R}_{k-1}(\tau) \mathbf{m}^{-1} + \lambda \sum_{i=1}^{k-1} \mathbf{R}_i(\tau) \mathbf{w} \mathbf{x}^- \mathbf{w} \mathbf{R}_{i-1}(\tau),$$

$$\mathbf{m} = \text{diag} \{ \mu_i \}, \quad \mathbf{w} = \text{diag} \left\{ \frac{s_i}{\mu_i} \right\}, \quad [\mathbf{R}_k(\tau)]_{ij} = R^{(k)}(\tau, \mu_i, \mu_j),$$

$$[\mathbf{x}_\mathbf{m}]_{ij} = x^-(\mu_i, \mu_j), \quad [\mathbf{x}_\mathbf{p}]_{ij} = x^+(\mu_i, \mu_j).$$

Уравнения (7.7) и (7.8) являются дифференциальными уравнениями Риккати и Ляпунова, соответственно. На основе анализа Главы 2 будем решать уравнение Риккати с помощью метода матричной экспоненты, а уравнение Ляпунова с помощью численного метода BDF (backward differential formula) [409]. Аналогичным образом строится процедура расчета функции пропускания T . Обобщение на случай двухслойной среды производится на основе равенства

$$R_{12}(\tau_1, \tau_2, \mu_0, \mu) = R_1(\tau_1, \mu_0, \mu) + \int_0^1 \int_0^1 T(\tau_1, \mu_0, \mu') R_2(\tau_2, \mu', \mu'') T(\tau_1, \mu'', \mu) d\mu' d\mu'', \quad (7.9)$$

где R_{12} – функция отражения от двухслойной системы, а R_1 и R_2 – функции отражения для первого и второго слоев, соответственно.

7.2.2 Восстановление сечений неупругого рассеяния

Восстановление сечений из спектра является плохо обусловленной некорректной задачей математической физики. Для нахождения сечений применим генетический алгоритм, основанный на многократном решении прямой задачи. Учет поверхностных плазмонов будем проводить в двухслойной модели. В каждом слое для регуляризации функция $x_{in}(\Delta)$ ищется в виде суперпозиции процессов возбуждения плазмонов $x_{pl\ i}(\Delta)$ и ионизации $x_{ion\ j}(\Delta)$:

$$x_{in}(\Delta) = \sum_{i=1}^{N_{pl}} \lambda_{pl\ i} x_{pl\ i}(\Delta) + \sum_{j=1}^{N_{ion}} \lambda_{ion\ j} x_{ion\ j}(\Delta), \quad (7.10)$$

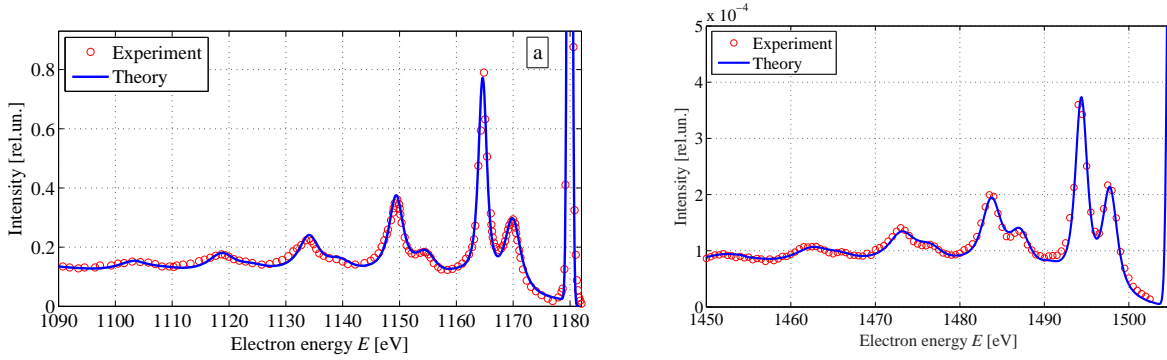


Рисунок 7.4 — Сравнение экспериментальных спектров характеристических потерь энергии со спектрами, рассчитанным на основе уравнения (7.3) (слева - Al, справа - Mg).

где N_{pl} и N_{ion} — количество плазмонов и потенциалов ионизации, а $\lambda_{pl\ i}$ и $\lambda_{ion\ j}$ — соответствующие веса. Для $x_{pl\ i}(\Delta)$ и $x_{ion\ j}(\Delta)$ используются формулы классического лоренцовского осциллятора и формулы Резерфорда, соответственно:

$$x_{pl\ i}(\Delta) = \frac{A_{pl\ i} \Delta^\beta}{(\Delta^2 - \varepsilon_{pl\ i}^2)^2 + b_i^{4-\alpha} \Delta^\alpha}, \quad x_{ion\ j}(\Delta) = \frac{A_{ion\ j}}{\Delta^{2+a}} \eta(\Delta - J_{ion\ j}), \quad (7.11)$$

где A_{pl} и A_{ion} — нормировочные коэффициенты, α , β и ε_{pl} — параметры асимметрии и положение максимума распределения энергетически потерь, соответственно, b — параметр затухания плазмона, a — параметр экранирования, ε_{pl} — положение плазмона, J_{ion} — потенциал ионизации, η — функция Хевисайда.

В процессе решения обратной задачи определяются параметры: α , β , a , b , а также толщина поверхностного слоя. Допускается вариация остальных параметров в пределах 5 % от их табличных значений. Расчеты выполнены совместно с В.П.Афанасьевым, А.С.Грязевым и П.С.Каплей. На рисунке 7.4 показан результат подгонки сечений для спектров характеристических потерь энергии для Al и Mg. Процедура восстановления сечений занимает не более 2 минут для каждого спектра. Для проверки корректности процедуры восстановленных сечений, произведен расчет спектров фото-электронной эмиссии с использованием полученных сечений. Процедура расчета также основана на методе инвариантного погружения и методе дискретных ординат. На рисунке 7.5 показано сравнение экспериментальных спектров фото-электронов с рассчитанными спектрами для Al и Mg. Хорошее совпадение спектров говорит о корректном определении параметров неупругого рассеяния. Время расчета фотоэлектронных спектров не превышает 0.1 секунды.

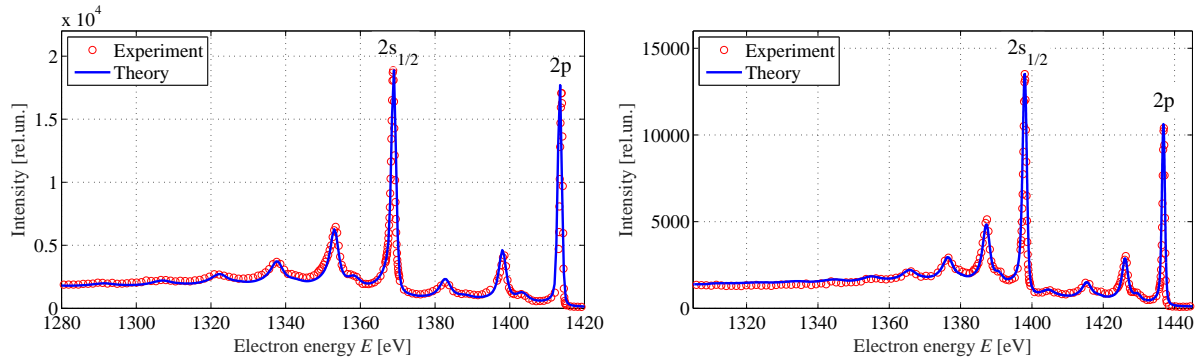


Рисунок 7.5 — Сравнение экспериментальных спектров фотоэлектронов со спектрами, рассчитанным на основе дифференциальных сечений неупругого рассеяния, восстановленных из спектров характеристических потерь энергии (слева – Al, справа – Mg).

Благодаря описанию процессов переноса электронов и света в рамках единого теоретического аппарата, электронная спектроскопия является удобным инструментом апробации методов, развитых для решения задач дистанционного зондирования атмосферы. Технологически возможно приготовить исследуемый многослойный образец с известным компонентным составом, что в оптике атмосферы невозможно. С другой стороны, благодаря появлению большого массива экспериментальных данных [410] и прогрессу в элементной базе электронной спектроскопии некоторые параметры электронного рассеяния (прежде всего, l_{in}) нуждаются в уточнении. Линеаризованные оптические модели типа LMDOM становятся полезным инструментом для интерпретации спектров отраженных электронов, а в сочетании с последними достижениями в области рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии [3] алгоритмы, развитые в оптике, становятся основой для высокоточного количественного анализа поверхности твердых тел.

Результаты Главы 7

1. Линеаризованные модели, созданные для решения обратных задач дистанционного зондирования, были апробированы на базе электронной спектроскопии. В частности, корректно воспроизведены угловые распределения упруго отраженных электронов и на их основе определена зависимость альбеда однократного рассеяния от глубины мишеней.

2. На основе модели парциальных интенсивностей построен численный метод расчета спектров характеристических потерь энергии на основе метода дискретных ординат. Дифференциальные сечения неупругого рассеяния, восстановленные из спектров характеристических потерь энергии, апробированы на основе рентгеновской фото-электронной эмиссии.

Заключение

Сформулируем основные результаты и выводы диссертационной работы:

1. Проведен анализ численных методов решения уравнения переноса. Показано, что после выделения анизотропной части тела яркости и дискретизации, уравнение имеет единственное аналитическое решение, что позволило выбрать пути ускорения алгоритма. Создан быстрый алгоритм расчета яркости отраженного излучения на базе малоугловой модификации метода сферических гармоник для псевдо-сферической модели атмосферы. Предложен метод левых собственных векторов для быстрого расчета матричной экспоненты.
2. Выполнена аналитическая линеаризация развитого алгоритма для расчета частных производных яркости по параметрам среды, что на порядок эффективнее метода конечных разностей. На основе реальных задач дистанционного зондирования по определению малых газовых концентраций показано, что выделение анизотропной части с помощью малоуглового приближения обуславливает высокую скорость счета в случае сильно анизотропных индикатрис рассеяния.
3. Предложен метод быстрого расчета спектров отраженного излучения, основанный на снижении размерности оптических данных. Метод построен на использовании корректирующей функции для двухпотокового приближения, которая рассчитывается в базисе меньшей размерности с помощью пяти вызовов мультипотоковой модели. Построена соответствующая линеаризованная модель для расчета матрицы Якоби. Скорость счета в полосе Хаггинса увеличивается в 8 раз при максимальной ошибке 0.2 %.
4. Развита метод моделирования сигнала ОЭС ОДЗ для атмосферы с разорванной облачностью на основе стохастической модели переноса излучения. Метод позволяет рассчитывать функцию отражения при известных средних размерах хорд областей с облаком. На основе сравнения с численным решением многомерной задачи показано, что ошибка стохастической модели по крайней мере вдвое ниже ошибки приближения независимых пикселей и не превышает 5 % для сценариев, используемых для восстановления озона. Скорость счета развитой стохастической модели на два порядка выше скорости решения многомерной задачи.

5. Из стохастической модели нулевого порядка получена модель внутреннего смешивания, в которой неоднородный слой облака представляется однородным слоем с эффективными параметрами среды. Соответствующие условия замыкания стохастической модели содержат подгоночный коэффициент, минимизирующий расхождение между моделью внутреннего смешивания и эталонной моделью. В качестве эталонной используется развитая стохастическую модель, что позволяет рассчитать справочные таблицы для коэффициента замыкания для реалистичных параметров облака.
6. Создан векторный код VSHDOM, позволяющий решать уравнение переноса в многомерном случае с учетом поляризации. Использование адаптивной сетки позволяет на порядок повысить точность расчета первого параметра Стокса. VSHDOM используется для оценки влияния неоднородностей облака на вид спектра, а также для апробации приближенных моделей переноса.
7. Построены две линеаризованные многомерные модели на основе кода SHDOM для расчета матрицы Якоби. Первая модель основана на аналитическом дифференцировании кода SHDOM. Во второй модели линеаризация осуществляется с помощью сопряженного уравнения переноса. Соответствующая этому подходу модель требует меньше памяти, однако она менее точная.
8. Создан операционный алгоритм восстановления общего содержания и профиля озона из полосы Хаггинса, учитывающий неоднородность облаков на базе стохастической модели. Разработанные в диссертации методы позволили ускорить обработку данных GOME-2 в 300 раз. Проведенные численные расчеты свидетельствуют о том, что точность определения профиля озона увеличивается как минимум вдвое, если определять оптимальный параметр регуляризации и параметры облака на основе стохастической модели.
9. Предложена регрессионная модель для определения высоты диоксида серы над очагами вулканической активности, основанная комбинировании использовании методов линейной и нелинейной регрессии, а также алгоритма быстрого моделирования сигнала ОЭС ОДЗ. Результирующий регрессионный оператор к измерениям GOME-2 над вулканами Kasatochi, Eyjafjallajokull, Etna и др. Получено хорошее совпадение с результатами IASI и CALIOP.
10. Одномерный алгоритм решения уравнения переноса излучения применен для описания эффекта поворота тела яркости в задачах электронной спектроскопии. Произведена

апробация алгоритма на базе угловых распределений упруго отраженных электронов. На основе последовательного описания процессов многократного рассеяния электронов в твердом теле восстановлены дифференциальные сечения неупругого рассеяния для набора материалов. Спектры фотоэлектронной эмиссии, рассчитанные на их основе, хорошо совпадают с экспериментальными данными.

Таким образом, настоящая диссертационная работа содержит законченное исследование, существенно расширяющее возможности и информативность современных гиперспектральных оптико-электронных систем оптического дистанционного зондирования атмосферы по восстановлению малых газовых концентраций. Совокупность полученных результатов образует новое научно обоснованное решение, внедрение которого позволяет обрабатывать данные, полученные в рамках современных и предстоящих миссий спутникового дистанционного зондирования. Разработанные в работе теоретические положения и радиационные коды позволяют перейти к разработке томографических алгоритмов решения трехмерных обратных задач дистанционного зондирования.

Приложения

Приложение А. Базисные интерполяционные функции

Пусть $\{\xi_k\}$, $k = 1, \dots, r+1$, есть множество $r+1$ интерполяционных точек на интервале $[-1, 1]$, причем $\xi_1 = -1$ и $\xi_{r+1} = 1$. Обозначим за $\{L_k^r(\xi)\}$ множество интерполяционных полиномов Лагранжа степени r . $\{L_k^r(\xi)\}$ связано с $\{\xi_k\}$ следующим образом:

$$L_k^r(\xi) = \prod_{l \neq k} \frac{\xi - \xi_l}{\xi_k - \xi_l}.$$

Аналогично обозначим за $\{L_1^1(\xi), L_{r+1}^1(\xi)\}$ множество линейных интерполяционных полиномов Лагранжа, построенных на граничных точках $\{\xi_1, \xi_{r+1}\}$:

$$L_1^1(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi), \quad L_{r+1}^1(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi).$$

Интерполяционные операторы ² порядка r и первого порядка определяются как

$$P_\xi^r f(\xi) = \sum_{k=1}^{r+1} L_k^r(\xi) f(\xi_k)$$

и

$$P_\xi^1 f(\xi) = \sum_{k=1; r+1} L_k^1(\xi) f(\xi_k)$$

соответственно. В трансфинитной теории интерполяции двумерный интерполянт $\hat{f}(\xi, \eta)$ функции $f(\xi, \eta)$ в области $[-1, 1] \times [-1, 1]$ может быть представлен в виде

$$\hat{f}(\xi, \eta) = (P_\eta^1 P_\xi^r + P_\xi^1 P_\eta^r - P_\xi^1 P_\eta^1) f(\xi, \eta), \quad (7.12)$$

где, например,

$$P_\eta^1 P_\xi^r f(\xi, \eta) = \sum_{k=1}^{r+1} L_k^r(\xi) P_\eta^1 f(\xi_k, \eta) = \sum_{k=1}^{r+1} \sum_{l=1; r+1} L_k^r(\xi) L_l^1(\eta) f(\xi_k, \eta_l).$$

²в англоязычной литературе, например, в [411] – interpolation projectors.

Используя (7.12), можно найти интерполяционные базисные функции для прямоугольного элемента в координатной системе $\xi = 2(x - \Delta x/2)/\Delta x$ и $\eta = 2(z - \Delta z/2)/\Delta z$:

1. для линейного элемента:

$$Q_k^1(\xi, \eta) = \frac{1}{4} (1 + \xi_k \xi) (1 + \eta_k \eta), \quad \xi_k, \eta_k = \pm 1.$$

2. для квадратичного элемента:

$$\begin{aligned} Q_k^2(\xi, \eta) &= \frac{1}{4} (1 + \xi_k \xi) (1 + \eta_k \eta) (\xi_k \xi + \eta_k \eta - 1), \quad \xi_k = \pm 1, \eta_k = \pm 1, \\ Q_k^2(\xi, \eta) &= \frac{1}{2} (1 - \xi^2) (1 + \eta_k \eta), \quad \xi_k = 0, \eta_k = \pm 1, \\ Q_k^2(\xi, \eta) &= \frac{1}{2} (1 + \xi_k \xi) (1 - \eta^2), \quad \xi_k = \pm 1, \eta_k = 0. \end{aligned}$$

3. для кубического элемента:

$$\begin{aligned} Q_k^3(\xi, \eta) &= \frac{1}{32} (1 + \xi_k \xi) (1 + \eta_k \eta) [9(\xi^2 + \eta^2) - 10], \quad \xi_k = \pm 1, \eta_k = \pm 1, \\ Q_k^3(\xi, \eta) &= \frac{9}{32} (1 + \xi_k \xi) (1 - \eta^2) (1 + 9\eta_k \eta), \quad \xi_k = \pm 1, \eta_k = \pm \frac{1}{3}, \\ Q_k^3(\xi, \eta) &= \frac{9}{32} (1 - \xi^2) (1 + 9\xi_k \xi) (1 + \eta_k \eta), \quad \xi_k = \pm \frac{1}{3}, \eta_k = \pm 1. \end{aligned}$$

Приложение Б. Разностные схемы нулевого порядка

В step-characteristic схеме аналитическое представление для функции $I_p(x, z)$ можно получить только с помощью некоторых допущений. В каждой точке на границах E и N , из которой выходит характеристика, последнюю продолжают назад до пересечения с левой или нижней границами. Интенсивность в точке выхода характеристики вычисляется с помощью интегрирования уравнения переноса излучения вдоль характеристики с постоянными значениями коэффициента экстинкции и произведения коэффициента экстинкции на функцию источников на ней. Далее, предполагается, что интенсивности в точках входа характеристики на границах W и S постоянные в пределах соответствующей границы и равны средним значениям по границе. Средние значения I_p^E и I_p^N рассчитываются с помощью интегрирования интенсивности вдоль границ E и N , соответственно. Введем усредненную по ячейке функцию источников

$$\bar{J}_p = \frac{1}{\bar{\sigma}_{\text{ext}}} \bar{S}_p$$

и вспомогательные параметры

$$\begin{aligned}\alpha &= \bar{\sigma}_{\text{ext}} \frac{\Delta x}{\Omega_x^p} \\ \beta &= \bar{\sigma}_{\text{ext}} \frac{\Delta z}{\Omega_z^p} \\ \rho &= \frac{\alpha}{\beta}\end{aligned}$$

Через них конечным расчетным формулам можно придать следующий вид:

$$\begin{aligned}I_p^E &= \bar{J}_p + \frac{1 - e^{-\beta}}{\beta} (I_p^S - \bar{J}_p) \\ I_p^N &= \bar{J}_p + \frac{1 - e^{-\beta}}{\rho\beta} (I_p^W - \bar{J}_p) + \left(1 - \frac{1}{\rho}\right) e^{-\beta} (I_p^S - \bar{J}_p)\end{aligned}\quad (7.13)$$

при $\rho > 1$, и

$$\begin{aligned}I_p^E &= \bar{J}_p + (1 - \rho) e^{-\alpha} (I_p^W - \bar{J}_p) + \rho \frac{1 - e^{-\alpha}}{\alpha} (I_p^S - \bar{J}_p) \\ I_p^N &= \bar{J}_p + \frac{1 - e^{-\alpha}}{\alpha} (I_p^W - \bar{J}_p)\end{aligned}\quad (7.14)$$

при $\rho < 1$.

Метод характеристик Woods-Carlson является модификацией метода характеристик Wendroff. Он гарантирует положительность средней по границе интенсивности. В схеме Wendroff характеристика проводится через центр ячейки. Проекция этой характеристики на плоскость (x, z) пересекает линию, проведенную через средние точки границ W и S , в точке B , и линию, проведенную через средние точки границ E и N в точке A . Интенсивность в точке выхода характеристики $A - I_p^A$ – связана с интенсивностью в точке выхода характеристики $B - I_p^B$ – через интегральную форму уравнения переноса излучения вдоль характеристики. Предполагается, что коэффициент экстинкции и произведение коэффициента экстинкции на функцию источников постоянны вдоль характеристики. Далее, значение I_p^B получается из линейной интерполяции между I_p^W и I_p^S по линии, соединяющей средние точки границ W и S . Аналогично, I_p^A рассчитывается с помощью линейной интерполяции между I_p^E и I_p^N . Для того, чтобы гарантировать положительность значений интенсивностей, делаются дополнительные предположения о том, что I_p^E и I_p^N линейно зависят от I_p^W и I_p^S . Итоговые расчетные формулы

схожи с формулами метода step-characteristic и имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} I_p^E &= e^{-\tau} I_p^S + (1 - e^{-\tau}) \bar{J}_p \\ I_p^N &= \frac{1}{\rho} e^{-\tau} I_p^W + \left(1 - \frac{1}{\rho}\right) e^{-\tau} I_p^S + (1 - e^{-\tau}) \bar{J}_p \end{aligned} \quad (7.15)$$

при $\rho > 1$, и

$$\begin{aligned} I_p^E &= (1 - \rho) e^{-\tau} I_p^W + \rho e^{-\tau} I_p^S + (1 - e^{-\tau}) \bar{J}_p \\ I_p^N &= e^{-\tau} I_p^W + (1 - e^{-\tau}) \bar{J}_p \end{aligned} \quad (7.16)$$

при $\rho < 1$, где $\tau = \bar{\sigma}_{\text{ext}} s$, и

$$s = \overline{AB} = \frac{1}{\Omega_x^p / \Delta x + \Omega_z^p / \Delta z}.$$

В взвешенной конечно-разностной схеме уравнение переноса записывается для некоторой внутренней точки (\bar{x}, \bar{z}) , а частные производные аппроксимируются конечными разностями. Тогда усредненные по границам интенсивности равны $I_p^E = I_p(\Delta x, \bar{z})$, $I_p^W = I_p(0, \bar{z})$, $I_p^N = I_p(\bar{x}, \Delta z)$ и $I_p^S = I_p(\bar{x}, 0)$, а усредненное по всей ячейке значение интенсивности равно $\bar{I}_p = I_p(\bar{x}, \bar{z})$. Применяя интерполяционные соотношения $\bar{I}_p = X I_p^E + (1 - X) I_p^W$ и $\bar{I}_p = Z I_p^N + (1 - Z) I_p^S$, где $X = \bar{x} / \Delta x$ и $Z = \bar{z} / \Delta z$, получим

$$\begin{aligned} I_p^E &= \frac{[\beta - (1 - X)(\alpha\beta + \alpha/Z)] I_p^W + (\alpha/Z) I_p^S + \alpha\beta \bar{J}_p}{\beta + X(\alpha\beta + \alpha/Z)} \\ I_p^N &= \frac{[\alpha - (1 - Z)(\alpha\beta + \beta/X)] I_p^S + (\beta/X) I_p^W + \alpha\beta \bar{J}_p}{\alpha + Z(\alpha\beta + \beta/X)} \end{aligned} \quad (7.17)$$

Веса X и Z выбираются таким образом, чтобы гарантировать положительность I_p^E и I_p^N . При этом, если $X = Z = 1/2$ мы получаем «алмазную» разностную схему [412], а если $X = Z = 1$ мы получаем step difference схему.

Приложение В. Вывод соотношений для разностной схемы первого порядка

Получим аналитическое выражение для \widehat{I}_p^4 в предположении, что σ_{ext} зависит линейно от s , а \widehat{S}_p является полиномом по параметру s . Соответствующий интеграл из (234) равен

$$\int_0^s \widehat{S}_p(s') e^{-\int_{s'}^s \sigma_{\text{ext}}(s'') ds''} ds' = \frac{1}{\bar{\sigma}_{\text{ext}}} (1 - e^{-\tau}) \mathcal{I}(\tau, \xi), \quad (7.18)$$

где $\bar{\sigma}_{\text{ext}} = (\sigma_{\text{ext}}^0 + \sigma_{\text{ext}}^1)/2$, $\tau = s\bar{\sigma}_{\text{ext}}$,

$$\mathcal{I}(\tau, \xi) = \int_0^1 \widehat{S}_p(x) \frac{\tau e^{-\tau[1-(1-\xi)x-\xi x^2]}}{1 - e^{-\tau}} dx,$$

$$x = s'/s,$$

$$\xi = \frac{\sigma_{\text{ext}}^1 - \sigma_{\text{ext}}^0}{\sigma_{\text{ext}}^1 + \sigma_{\text{ext}}^0}.$$

Верхние индексы «0» и «1» относятся к точке входа и выхода характеристики, соответственно. Для малых оптических толщин разложим $\mathcal{I}(\tau, \xi)$ в ряд Тейлора и оставим два слагаемых

$$\mathcal{I}(\tau, \xi) = \mathcal{I}(0, \xi) + \tau \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \tau}(0, \xi). \quad (7.19)$$

Для больших оптических толщ найдем $\mathcal{I}(\tau, \xi)$ в виде

$$\mathcal{I}(\tau, \xi) = \mathcal{I}(0, \xi) + g(\tau) \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \tau}(0, \xi). \quad (7.20)$$

Предполагая, что функция $\mathcal{I}(\tau, 0)$ может быть вычислена аналитически, положим $\xi = 0$ в (7.20) и найдем $g(\tau)$ из уравнения

$$\mathcal{I}(\tau, 0) = \mathcal{I}(0, 0) + g(\tau) \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \tau}(0, 0).$$

Из разложения

$$\mathcal{I}(\tau, 0) = \mathcal{I}(0, 0) + \tau \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \tau}(0, 0) + \sum_{k \geq 2} \frac{1}{k!} \tau^k \frac{\partial^k \mathcal{I}}{\partial \tau^k}(0, 0)$$

следует альтернативное представление для функции g :

$$g(\tau) = \tau + \left(\frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \tau}(0, 0) \right)^{-1} \sum_{k \geq 2} \frac{1}{k!} \tau^k \frac{\partial^k \mathcal{I}}{\partial \tau^k}(0, 0).$$

При $\tau \rightarrow 0$ функция $g(\tau)$ ведет себя как τ . Выражение (7.20) справедливо для малых оптических толщ и постоянного коэффициента экстинкции ($\xi = 0$).

Предположим, что $\widehat{S}_p(x)$ имеет полиномиальную зависимость степени $r + 1$, т.е.

$$\widehat{S}_p(x) = \sum_{k=0}^{r+1} a_k x^k.$$

Можно показать, что вспомогательные функции (7.19) и (7.20) имеют вид

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(0, \xi) &= \sum_{k=0}^{r+1} \frac{1}{k+1} a_k, \\ \frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \tau}(0, \xi) &= \sum_{k=0}^{r+1} \left[\frac{k}{2(k+1)(k+2)} - \frac{\xi}{(k+2)(k+3)} \right] a_k \end{aligned} \quad (7.21)$$

и

$$g(\tau) = \left(\frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \tau}(0, 0) \right)^{-1} \sum_{k=0}^{r+1} a_k \left[B_k(\tau) - \frac{1}{k+1} \right], \quad (7.22)$$

где

$$\frac{\partial \mathcal{I}}{\partial \tau}(0, 0) = \sum_{k=0}^{r+1} \frac{k}{2(k+1)(k+2)} a_k. \quad (7.23)$$

Функции $B_k(\tau)$ вычисляются рекурсивно

$$B_k(\tau) = \frac{1}{1 - e^{-\tau}} - \frac{k}{\tau} B_{k-1}(\tau), \quad k \geq 1,$$

начиная с $B_0(\tau) = 1$.

При $r = 0$ \widehat{S}_p является линейной функцией от x , а коэффициенты a_0 и a_1 определяются значениями \widehat{S}_p в точках входа и выхода характеристики; при этом

$$\mathcal{I}(\tau, \xi) = \left(a_0 + \frac{a_1}{2} \right) + g(\tau) \left[\frac{a_1}{12} - \xi \left(\frac{a_0}{6} + \frac{a_1}{12} \right) \right], \quad (7.24)$$

где

$$g(\tau) = 12 \left(\frac{1}{1 - e^{-\tau}} - \frac{1}{\tau} - \frac{1}{2} \right).$$

Выражение (7.24) соответствует интерполяционной схеме (5.16) и было получено в работе [187]. При $r = 1$ \widehat{S}_p имеет квадратичную зависимость от x , а коэффициенты a_0 , a_1 и a_2

определяются значениями \widehat{S}_p в точках входа и выхода характеристики; при этом

$$\mathcal{I}(\tau, \xi) = \left(a_0 + \frac{a_1}{2} + \frac{a_2}{3}\right) + g(\tau) \left[\frac{a_1 + a_2}{12} - \xi \left(\frac{a_0}{6} + \frac{a_1}{12} + \frac{a_2}{20}\right)\right], \quad (7.25)$$

где

$$g(\tau) = \frac{12}{a_1 + a_2} \left\{ \left(\frac{1}{1 - e^{-\tau}} - \frac{1}{\tau} - \frac{1}{2} \right) a_1 + \left[\frac{1}{1 - e^{-\tau}} - \frac{2}{\tau} \left(\frac{1}{1 - e^{-\tau}} - \frac{1}{\tau} \right) - \frac{1}{3} \right] a_2 \right\}.$$

Значения \widehat{S}_p в точке входа и на характеристике определяются с помощью билинейной интерполяции. Выражение (7.25) соответствует интерполяционной схеме (5.6). При $a_2 = 0$, выражение (7.25) приобретает вид (7.24).

Приложение Г. Доказательство ортогональности для \mathbf{P}_{nm}

Произведение матриц $\mathbf{P}_{nm} \mathbf{P}_{n'm}$ может быть представлено в виде

$$\mathbf{P}_{nm}(\mu) \mathbf{P}_{n'm}(\mu) = \begin{bmatrix} a_{nn'}(\mu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_{nn'}^+(\mu) & b_{nn'}^-(\mu) & 0 \\ 0 & b_{nn'}^-(\mu) & b_{nn'}^+(\mu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{nn'}(\mu) \end{bmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} a_{nn'}(\mu) &= d_{m0}^n(\mu) d_{m0}^{n'}(\mu), \\ b_{nn'}^+(\mu) &= d_{m+}^n(\mu) d_{m+}^{n'}(\mu) + d_{m-}^n(\mu) d_{m-}^{n'}(\mu), \\ b_{nn'}^-(\mu) &= d_{m+}^n(\mu) d_{m-}^{n'}(\mu) + d_{m-}^n(\mu) d_{m+}^{n'}(\mu). \end{aligned}$$

Используя соотношение (5.28), можно получить, что

$$\begin{aligned} b_{nn'}^+(\mu) &= \frac{1}{2} \left[d_{m2}^n(\mu) d_{m2}^{n'}(\mu) + d_{m-2}^n(\mu) d_{m-2}^{n'}(\mu) \right], \\ b_{nn'}^-(\mu) &= \frac{1}{2} \left[d_{m2}^n(\mu) d_{m2}^{n'}(\mu) - d_{m-2}^n(\mu) d_{m-2}^{n'}(\mu) \right]. \end{aligned}$$

Из условия ортогональности (5.33) следует, что

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 a_{nn'}(\mu) d\mu &= \delta_{nn'}, \\
\int_{-1}^1 b_{nn'}^+(\mu) d\mu &= \begin{cases} 0, & n = 0, 1 \\ \delta_{nn'}, & n > 1 \end{cases}, \\
\int_{-1}^1 b_{nn'}^-(\mu) d\mu &= 0,
\end{aligned}$$

что и доказывает соотношение (5.34).

Другое доказательство можно построить, исходя из соотношения

$$\mathbf{P}_{nm} = (-j)^m \mathbf{T}^* \mathbf{A}^{-1} \mathbf{P}_{nm}^{\text{ср}} \mathbf{A} \mathbf{T},$$

где матрица $\mathbf{P}_{nm}^{\text{ср}}$ определена через нормированные обобщенные сферические гармоники $P_{mm'}^n$ как

$$\mathbf{P}_{nm}^{\text{ср}} = \begin{bmatrix} P_{m2}^n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_{m0}^n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P_{m0}^n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_{m-2}^n \end{bmatrix},$$

а матрица

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & j & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -j & 0 \end{bmatrix}$$

используется для расчета фазовой матрицы в циркулярном базисе через преобразование $\mathbf{Z}_{\text{ср}} = \mathbf{A} \mathbf{Z} \mathbf{A}^{-1}$. Далее, используя свойство ортогональности обобщенных сферических функций,

$$\int_{-1}^1 P_{mm'}^n(\mu) P_{mm'}^{n'}(\mu) d\mu = (-1)^{m+m'} \delta_{nn'},$$

можно получить (5.34). Заметим, что обобщенные сферические гармоники, использующиеся в представлении в циркулярном базисе, имеют вид

$$\mathbf{Y}_{nm}^{\text{ср}}(\mu, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathbf{P}_{nm}^{\text{ср}}(\mu) e^{jm\varphi},$$

а из соотношения

$$\mathbf{Y}_{nm}(\mu, \varphi) = (-j)^m \mathbf{A}^{-1} \mathbf{Y}_{nm}^{\text{cp}}(\mu, \varphi) \mathbf{A} \mathbf{T},$$

и полноты системы функций $\{\mathbf{Y}_{nm}^{\text{cp}}\}$ на единичной сфере следует полнота системы $\{\mathbf{Y}_{nm}\}$ на единичной сфере.

Также приведем рекуррентное соотношение для \mathbf{Y}_{nm} . Из рекуррентного соотношения для нормированных обобщенных сферических функций

$$\sqrt{2n+1} \left[\mu - \frac{mm'}{n(n+1)} \right] P_{mm'}^n(\mu) = \frac{1}{\sqrt{2n+3}} a_{mm'}^{n+1} P_{mm'}^{n+1}(\mu) + \frac{1}{\sqrt{2n-1}} a_{mm'}^n P_{mm'}^{n-1}(\mu),$$

где

$$a_{mm'}^n = \frac{\sqrt{n^2 - m^2} \sqrt{n^2 - m'^2}}{n},$$

следует

$$\begin{aligned} \mu \mathbf{Y}_{nm}(\mu, \varphi) &= \mathbb{B}_{nm} \mathbf{Y}_{nm}(\mu, \varphi) + \frac{1}{\sqrt{2n+1}\sqrt{2n+3}} \mathbb{A}_{n+1m} \mathbf{Y}_{n+1m}(\mu, \varphi), \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2n+1}\sqrt{2n-1}} \mathbb{A}_{nm} \mathbf{Y}_{n-1m}(\mu, \varphi) \end{aligned} \quad (7.26)$$

где $\mathbb{A}_{nm} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{A}_{nm} \mathbf{A}$, $\mathbb{B}_{nm} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}_{nm} \mathbf{A}$, $\mathbf{A}_{nm} = \text{diag}[a_{m2}^n, a_{m0}^n, a_{m0}^n, a_{m-2}^n]$, $\mathbf{B}_{nm} = \frac{m}{n(n+1)} \text{diag}[2, 0, 0, -2]$. Можно также получить рекуррентные соотношения для \mathbf{U}_{nm} и \mathbf{V}_{nm} , взяв действительную и мнимую части от (7.26), соответственно.

Приложение Д. Регуляризация решения

Регуляризационное слагаемое в (6.10) позволяет тем или иным образом использовать априорные сведения о решении. Есть несколько способов построить регуляризационную матрицу \mathbf{L} . Если мы хотим контролировать величину решения, то в качестве \mathbf{L} берется единичная или диагональная матрица ($\mathbf{L} = \mathbf{L}_0$). Если решение должно быть гладким, то за \mathbf{L} принимается дискретное приближение дифференциального оператора (\mathbf{L}_1). В общем случае рекомендуется использовать второй путь, так как из-за шума $\|\mathbf{L}_1 \cdot\| \gg \|\mathbf{L}_0 \cdot\|$, и, минимизируя

$\|\mathbf{L}_1\|$, мы уменьшаем его влияние. Матрица \mathbf{L}_1 может иметь вид

$$\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} -1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times n} \quad (7.27)$$

или

$$\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}. \quad (7.28)$$

Обе матрицы (7.27) и (7.28) сглаживают решение, хотя на практике матрица (7.28) предпочтительнее³. Результирующая матрица может быть рассчитана как

$$\mathbf{L}^T \mathbf{L} = \omega_0 \mathbf{L}_0^T \mathbf{L}_0 + \omega_1 \mathbf{L}_1^T \mathbf{L}_1, \quad (7.29)$$

где $\omega_0 + \omega_1 = 1$.

Приложение Е. Снижение размерности спектральных данных с помощью метода главных компонент

Мы рассмотрим снижение размерности спектральных данных с помощью метода главных компонент и его аналогов. И хотя соответствующие методы хорошо известны и алгоритмы для них реализованы в многих математических библиотеках для статистического анализа (например, библиотека `scikit-learn` [413] для Python), ниже приведена основная теория для того, чтобы ввести необходимые далее обозначения. Для ясности по тексту указаны размерности матриц с помощью обозначения $\in M_{\dim}(\mathbb{R})$.

³Дело в том, что матрица (7.27) имеет регуляризационный эффект тогда и только тогда, когда её ядро не совпадает с ядром матрицы \mathbf{K} , в отличие от матрицы (7.28).

Пусть $\mathbf{r} = (r(\lambda_1), r(\lambda_2), \dots, r(\lambda_W))^T$ есть вектор значений яркости при W длин волн λ . Заданное множество спектров $\mathbf{R} = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_S\} \in M_{S \times W}(\mathbb{R})$ может быть представлено в новом базисе как

$$\mathbf{r}_i = \bar{\mathbf{R}} + \sum_{k=1}^W x_{ik} \mathbf{f}_k, \quad (7.30)$$

где $\bar{\mathbf{R}} = \frac{1}{W} \sum_{i=1}^W \mathbf{r}_i$, $\bar{\mathbf{R}} \in M_{W \times 1}(\mathbb{R})$ – средний по множеству \mathbf{R} спектр, x_{ik} – k -тая компонента вектора \mathbf{r}_i в новом базисе, а $\mathbf{f}_k = (f_k(\lambda_1), f_k(\lambda_2), \dots, f_k(\lambda_W))^T \in M_{W \times 1}(\mathbb{R})$ – k -тый базисный вектор нового базиса. Далее предполагается, что \mathbf{R} может быть приближенно описан линейным многообразием меньшей размерности. Тогда спектр \mathbf{r}_i проектируется в K -размерное подпространство ($K < W$):

$$\mathbf{r}_i \approx \bar{\mathbf{R}} + \sum_{k=1}^K x_{ik} \mathbf{f}_k, \quad (7.31)$$

или в матричной форме для \mathbf{R} :

$$\mathbf{R} \approx \bar{\mathbf{R}} + \mathbf{X}\mathbf{F}^T, \quad (7.32)$$

где $\mathbf{F} = \{\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \dots, \mathbf{f}_K\} \in M_{W \times K}(\mathbb{R})$ и $\mathbf{X} = \{x_{ik}\}_{i=1, \dots, S, k=1, \dots, K} \in M_{S \times K}(\mathbb{R})$.

Преобразование (7.31) осуществляется с помощью одного из методов снижения размерности, например, с помощью метода главных компонент [272]. В последнем случае набор новых базисных векторов \mathbf{F} в (7.32) называется эмпирическими ортогональными функциями (в англоязычной литературе “principal components” (PC)), а x_{ik} называются координатами в новом базисе (“the principal component scores” (PCS)). Далее рассматривается спектральная декомпозиция ковариационной матрицы $\text{cov}(\mathbf{R}, \mathbf{R}) \equiv \mathbf{C}_{RR} \in M_{W \times W}(\mathbb{R})$:

$$\mathbf{C}_{RR} = \mathbf{E}\mathbf{\Lambda}\mathbf{E}^T, \quad (7.33)$$

где $\mathbf{E} \in M_{W \times W}(\mathbb{R})$ – матрица собственных векторов и $\mathbf{\Lambda} \in M_{W \times W}(\mathbb{R})$ – диагональная матрица собственных значений. В качестве главных компонент берут K собственных векторов, соответствующих K наибольшим собственным значениям. Координаты в новом базисе считаются как

$$\mathbf{X} = (\mathbf{R} - \bar{\mathbf{R}}) \mathbf{F}. \quad (7.34)$$

Величина K зависит от того, сколь точно требуется воспроизвести разброс значений в исходном множестве. Существует несколько полуэмпирических правил для оптимального числа главных компонент (например, правило сломанной трости [414]). Тем не менее, универсального правила для K нет и его оптимальное значение зависит от конкретного приложения (требуемой точности и статистики исходного множества). На практике K может быть много меньше W , и при этом K главных компонент достаточно, чтобы воспроизвести \mathbf{R} с хорошей точностью. При выборе параметра K следует также учитывать, что главные компоненты высокого порядка часто описывают шум в спектрах, нежели полезный сигнал. Таким образом, имеет смысл пренебрегать ими (однако в последнее время с развитием математических методов такой подход всё чаще критикуется [415]).

Слова благодарности

Автор произносит слова благодарности своему первому научному руководителю Виктору Петровичу Афанасьеву и Александру Владимировичу Лубенченко, под чьим руководством автором были сделаны первые шаги в области решения обратных задач. Автор благодарит Владимира Павловича Будака, ответившего на сотни вопросов по многим темам, список которых включает теорию переноса излучения, но ею не ограничивается. Автор признателен преподавателям и коллегам из Московского энергетического института за созидательную образовательную среду. Отдельных слов благодарности заслуживает Адриан Дойку, ставший коллегой и другом, с которым автору удалось обсудить множество интересных научных проблем.

И самые теплые слова автор произносит родителям Ефременко Сергею Владимировичу и Ефременко Елене Валентиновне и супруге Алине Андреевне Васильевой за моральную поддержку автора.

Список использованных источников

1. Handbook of X Ray Photoelectron Spectroscopy / J.F. Moulder, W.F. Stickle, P.E. Sobol, K.D. Bomben. — Physical Electronics, 1995.
2. Powell C.J., Jablonski A. Progress in quantitative surface analysis by X-ray photoelectron spectroscopy: Current status and perspectives // [Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena](#). — 2010. — Vol. 178-179. — P. 331–346.
3. Modern methods of transfer theory used for solution of signal identification problems of XPS / V.P. Afanas'ev, P.S. Kaplya, A.V. Lubenchenko, O.I. Lubenchenko // [Vacuum](#). — 2014. — Vol. 105. — P. 96–101.
4. Vos M., Cornish G. P., Weigold E. High-energy (e, 2e) spectrometer for the study of the spectral momentum density of materials // [Review of Scientific Instruments](#). — 2000. — Vol. 71, no. 10. — P. 3831.
5. Обработка сигналов в задачах лазерного газоанализа атмосферы / М.Л. Белов, В.А. Городничев, Д.Б. Добрица, В.И. Козинцев // Вестник МГТУ им. Н.Э.Баумана. — 2001. — Т. 45, № 4. — С. 83–88.
6. Сравнительный анализ вероятности обнаружения пленок нефтепродуктов на водной поверхности лазерным рефлектометрическим методом на безопасных для зрения длинах волн / М.Л. Белов, Ю.И. Всякова, Д.А. Кравцов и др. // [Наука и образование: научное издание МГТУ им.Н.Э.Баумана](#). — 2017. — Т. 17, № 1. — С. 77–91.
7. The Global Ozone Monitoring Experiment (GOME): mission concept and first scientific results / J.P. Burrows, M. Weber, M. Buchwitz et al. // [J Atmos Sci](#). — 1999. — Vol. 56, no. 2. — P. 151–175.
8. GOME Users Manual. — ESA/ESTEC, Noordwijk, The netherlands, 1998.
9. SCIAMACHY: A European proposal for atmospheric remote sensing from the ESA polar platfrom / J.P. Burrows, K. Chance, P. Crutzen et al. — Max- Plank Institut fur Chemie, Mainz, Germany, 1988.
10. SCIAMACHY: Mission objectives and measurement modes / H. Bovensmann, J.P. Burrows, M. Buchwitz et al. // [J Atmos Sci](#). — 1999. — Vol. 56, no. 2. — P. 127–150.
11. Hadamard J. Sur les problèmes aux Dérivées partielles et leur signification physique // Princeton University Bulletin. — 1902. — Vol. 13. — P. 49–52.

12. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. — М., Наука, 1974.
13. Afanas'ev V., Lubenchenko A., Gubkin M. Quantitative interpretation of EELS and REELS spectra // [Eur Phys J B](#). — 2004. — Vol. 37. — P. 117–125.
14. Афанасьев В.П., Ефременко Д.С., Лубенченко А.В. Спектроскопия заряженных частиц, упругорассеянных плоскопараллельными слоями твердого тела // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2008. — № 5. — С. 45–49.
15. Study of Nb/Al interface combining spectroscopy of reflected electrons with ion sputtering / A.V. Lubenchenko, V.P. Afanas'ev, M.V. Lukashevsky et al. // [J Phys Conf series](#). — 2008. — Vol. 97, no. 1. — P. 012210(1–6).
16. Спектроскопия резерфордского рассеяния электронов – новый инструмент исследования твердых тел / В.П. Афанасьев, Д.С. Ефременко, А.В. Лубенченко и др. // Вестник МЭИ. — 2009. — № 4. — С. 39–46.
17. Афанасьев В.П., Ефременко Д.С., Лубенченко А.В. Прямое численное восстановление сечений неупругого рассеяния из спектров REELS и ISS // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2011. — № 4. — С. 77–84.
18. The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database / L.S. Rothman, I.E. Gordon, A. Barbe et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2009. — Vol. 110, no. 9–10. — P. 533–572.
19. Перов С.П., Хргиан А.Х. Современные проблемы атмосферного озона. — Л.: Гидрометеоиздат, 1980.
20. Хргиан А.Х. Физика атмосферного озона. — Л.: Гидрометеоиздат, 1973.
21. S5P/TROPOMI Total Ozone ATBD : Rep. / DLR–BIRA ; Executor: R. Spurr, D. Loyola, M. Roozendael, C. Lerot : 2016. — Access mode: http://www.tropomi.eu/sites/default/files/files/S5P-L2-DLR-ATBD-400A_TROPOMI_TotalOzone_v1p0p0_20160201.pdf.
22. Tsi-Ze Ny, Piaw Choong. Sur l'absorption ultraviolet de l'ozone // *Chin J Phys*. — 1933. — Vol. 1. — P. 38–54.
23. Inn E., Tanaka Y. [Ozone absorption coefficients in visible and ultraviolet regions](#) // *Ozone Chemistry and Technology*. — American chemical society, Washington, 1959. — P. 263–268.
24. Atmospheric remote-sensing reference data from GOME-2. Temperature-dependent absorption cross sections of O₃ in the 231–794 nm range / J.P. Burrows, A. Richter, A. Dehn et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1999. — Vol. 61, no. 4. — P. 509–517.

25. Measurements of molecular absorption spectra with the SCIAMACHY pre-flight model: instrument characterization and reference data for atmospheric remote-sensing in the 230–2380 nm region / K. Bogumil, J. Orphal, T. Homann et al. // *J Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. — 2003. — Vol. 157, no. 2–3. — P. 167–184.
26. Ozone UV spectroscopy. I. Absorption cross-sections at room temperature / D. Daumont, J. Brion, J. Charbonnier, J. Malicet // *J Atmos Chem*. — 1992. — Vol. 15, no. 2. — P. 145–55.
27. Мартынов Д.Я. Курс практической астрофизики. — М., Наука, 1977.
28. Wagner T., Beirle S., Deutschmann T. Three-dimensional simulation of the Ring effect in observations of scattered sun light using Monte Carlo radiative transfer models // *Atmospheric Measurement Techniques*. — 2009. — apr. — Vol. 2, no. 1. — P. 113–124.
29. Investigation of DOAS issues affecting the accuracy of the GDP version 3.0 total ozone product / M. Roozendael, V. Soebijanta, C. Fayt, J-C. Lambert // ERS-2 GOME GDP 3.0 Implementation and Delta Validation / Ed. by J.-C. Lambert. — ERSE-DTEX-EOAD-TN-02-0006, ESA/ESRIN, Frascati, Italy, 2002. — P. 97–129. — Access mode: http://wdc.dlr.de/sensors/gome/gdp4/roozendael_2002.pdf.
30. Discrete-ordinate radiative transfer in a stratified medium with first-order rotational Raman scattering / R. Spurr, J. Haan, R. Oss, A. Vasilkov // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2008. — Vol. 109, no. 3. — P. 404–425.
31. Chance K.V., Spurr R.J.D. Ring effect studies: Rayleigh scattering, including molecular parameters for rotational Raman scattering, and the Fraunhofer spectrum // *Appl Opt*. — 1997. — Vol. 36. — P. 5224–5230.
32. McCartney E.J. Optics of the atmosphere: Scattering by molecules and particles. — New York, John Wiley and Sons, Inc., 1976.
33. Bates D.R. Rayleigh scattering by air // *Planetary and Space Science*. — 1984. — Vol. 32, no. 6. — P. 785 – 790.
34. On rayleigh optical depth calculations / Barry A. Bodhaine, Norman B. Wood, Ellsworth G. Dutton, James R. Slusser // *J Atmos Oceanic Technol*. — 1999. — Vol. 16. — P. 1854–1861.
35. Seinfeld J.H., Pandis S.N. Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change. — Wiley, 2012. — ISBN: 9781118591505.
36. Mie Gustav. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen // *Annalen der Physik*. — 1908. — Bd. 330, H. 3. — S. 377–445.

37. Waterman P.C. Matrix formulation of electromagnetic scattering // [Proceedings of the IEEE](#). — 1965. — Vol. 53, no. 8. — P. 805–812.
38. Mishchenko M.I., Travis L.D., Mackowski D.W. T-matrix computations of light scattering by nonspherical particles: A review // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1996. — Vol. 55, no. 5. — P. 535–575. — Light Scattering by Non-Spherical Particles.
39. Hess M., Koepke P., Schult I. Optical properties of aerosols and clouds. The software package OPAC. // [Bull Am Meteorol Soc](#). — 1998. — Vol. 79, no. 5. — P. 831–44.
40. Second Simulation of the Satellite Signal in the Solar Spectrum, 6S: an overview / E.F. Vermote, D. Tanre, J.L. Deuze et al. // [IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing](#). — 1997. — may. — Vol. 35, no. 3. — P. 675–686.
41. [Dependence of direct aerosol radiative forcing on the optical properties of atmospheric aerosol and underlying surface](#) / C. Tomasi, C. Lanconelli, A. Lupi, M. Mazzola // [Light Scattering Reviews 8](#). — Springer Nature, 2013. — P. 505–627.
42. [Aerosol models](#) / C. Tomasi, M. Mazzola, C. Lanconelli, A. Lupi // [Atmospheric aerosols. Life Cycles and Effects on Air Quality and Climate](#) / Ed. by C. Tomasi, S. Fuzzi, A. Kokhanovsky. — Wiley-Blackwell, 2016. — P. 247–340.
43. Зуев В.Е., Титов Г.А. Современные проблемы атмосферной оптики (Том 9. Оптика атмосферы и климат). — Издательство "Спектр" Института оптики атмосферы СО РАН, 1996.
44. Ahmad Z. Spectral properties of backscattered UV radiation in cloudy atmospheres // [Journal of Geophysical Research](#). — 2004. — Vol. 109, no. D1.
45. Boersma K. F. Error analysis for tropospheric NO₂ retrieval from space // [Journal of Geophysical Research](#). — 2004. — Vol. 109, no. D4.
46. Ten years of GOME/ERS-2 total ozone data: the new GOME Data Processor (GDP) Version 4: I. Algorithm Description / V.M Roozendael, D. Loyola, R. Spurr et al. // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 2006. — Vol. 111. — P. D14311(1–21).
47. Будаков В.П., Козельский А.В. О точности и границах применимости малоуглового приближения // [Оптика атмосферы и океана](#). — 2005. — Т. 18. № 1-2. — С. 38–44.
48. Будаков В.П., Лубенченко А.В. Точность и границы применимости приближения квазиоднократного рассеяния при расчете сигнала обратного рассеяния // [Оптика атмосферы и океана](#). — 2007. — Т. 20. — С. 577–582.

49. Natraj V., Spurr R. A fast linearized pseudo-spherical two orders of scattering model to account for polarization in vertically inhomogeneous scattering-absorbing media // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2007. — Vol. 107, no. 2. — P. 263–293.
50. Eddington A.S. On the radiative equilibrium of the stars // *Mon Not R Astron Soc.* — 1916. — Vol. 77. — P. 16–35.
51. Milne E.A. The reflection effect in eclipse binaries // *Mon Not R Astron Soc.* — 1926. — Vol. 87. — P. 43–55.
52. Chandrasekhar S. Radiative transfer. — London: Oxford University Press, 1950.
53. Dahlback A., Stamnes K. A new spherical model for computing the radiation field available for photolysis and heating at twilight // [Planet Space Sci.](#) — 1991. — Vol. 39, no. 5. — P. 671–683.
54. Spurr R. Simultaneous derivation of intensities and weighting functions in a general pseudo-spherical discrete ordinate radiative transfer treatment // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2002. — Vol. 75, no. 2. — P. 129–175.
55. Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo method // *Journal of the American Statistical Association.* — 1949. — Vol. 247. — P. 335–341.
56. [The Monte Carlo Methods in Atmospheric Optics](#) / G.I. Marchuk, G.A. Mikhailov, M.A. Nazaraliev et al. — Springer Berlin Heidelberg, 1980. — Vol. 12 of Springer Series in Optical Sciences.
57. Wang M.C., Guth E. On the theory of multiple scattering, particularly of charged particles // [Phys Rev.](#) — 1951. — Vol. 84. — P. 1092–1111.
58. Numerically stable algorithm for discrete-ordinate-method radiative transfer in multiple scattering and emitting layered media / K. Stamnes, S.C. Tsay, W. Wiscombe, K. Jayaweera // [Appl Opt.](#) — 1988. — Vol. 12. — P. 2502–2509.
59. Radiative transfer through terrestrial atmosphere and ocean: Software package SCIATRAN / V.V. Rozanov, A.V. Rozanov, A.A. Kokhanovsky, J.P. Burrows // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2014. — Vol. 133. — P. 13–71.
60. Doicu A., Trautmann T. Discrete-ordinate method with matrix exponential for a pseudo-spherical atmosphere: Scalar case // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2009. — Vol. 110, no. 1-2. — P. 146–158.
61. Гермогенова Т.А. О решении уравнения переноса при сильном неизотропном рассеянии // *ДАН СССР.* — 1957. — Т. 113. — С. 297–300.

62. Wiscombe W.J. The delta-M method: Rapid yet accurate radiative flux calculations for strongly asymmetric phase functions // [J Atmos Sci.](#) — 1977. — Vol. 34, no. 9. — P. 1408–1422.
63. Nakajima T., Tanaka M. Algorithms for radiative intensity calculations in moderately thick atmos using a truncation approximation // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer.](#) — 1988. — Vol. 40, no. 1. — P. 51–69.
64. Hammad A., Chapman S. The primary and secondary scattering of sunlight in a plane-stratified atmosphere of uniform composition // [Phil Mag.](#) — 1939. — Vol. 28, no. 186. — P. 99–110.
65. Dave J.V. Importance of higher order scattering in a molecular atmosphere // [J Opt Soc Am.](#) — 1964. — Vol. 54, no. 3. — P. 307–315.
66. Hovenier J.W. Multiple scattering of polarized light in planetary atmospheres // [Astron Astrophys.](#) — 1971. — Vol. 13. — P. 7–29.
67. Korkin S.V., Lyapustin A.I., Marshak A. On the accuracy of double scattering approximation for atmospheric polarization computations // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer.](#) — 2012. — Vol. 113, no. 2. — P. 172–181.
68. Соболев В.В. Перенос лучистой энергии в атмосферах звёзд и планет. — М.: ГИТТЛ, 1956.
69. Соболев В.В. Рассеяние света в атмосферах планет. — М.: Наука, 1972.
70. Соболев В.В. Курс теоретической астрофизики. — М.: Наука, 1972.
71. Будаков В.П., Сармин С.Э. Решение уравнения переноса излучения методом сферических гармоник в малоугловой модификации // [Оптика атмосферы и океана.](#) — 1990. — Т. 3. — С. 981–987.
72. Будаков В.П. Малоугловая теория диффузного светового поля в мутной среде. Диссертация на соискание ученой степени д.т.н. — М., МЭИ, 1998.
73. Будаков В.П., Козельский А.В., Савицкий Е.Н. Улучшение сходимости метода сферических гармоник при сильно анизотропном рассеянии // [Оптика атмосферы и океана.](#) — 2004. — Т. 17. — С. 36–41.
74. Budakov V.P., Korkin S.V. On the solution of a vectorial radiative transfer equation in an arbitrary three-dimensional turbid medium with anisotropic scattering // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer.](#) — 2008. — Vol. 109, no. 2. — P. 220–234.

75. Budak V.P., Efremenko D.S., Shagalov O.V. Efficiency of algorithm for solution of vector radiative transfer equation in turbid medium slab // *J Phys Conf series*. — 2012. — Vol. 369. — P. 012021(1–10).
76. Budak V.P., Klyuykov D.A., Korkin S.V. Complete matrix solution of radiative transfer equation for PILE of horizontally homogeneous slabs // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2011. — Vol. 112, no. 7. — P. 1141–1148.
77. Korkin S.V., Lyapustin A.I., Rozanov V.V. Modifications of discrete ordinate method for computations with high scattering anisotropy: Comparative analysis // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2012. — Vol. 113, no. 16. — P. 2040–2048.
78. Budak V.P., Efremenko D.S. Implementation of vector radiative transfer equation solutions on Intel processors // NATO ASI on Special Detection Technique (Polarimetry) and Remote Sensing. — 2010. — P. 36.
79. Будак В.П., Илюшин Я.А. Учет дисперсии длин путей рассеянного света в малоугловом приближении теории переноса излучения // *Оптика атмосферы и океана*. — 2010. — Т. 23. — С. 102–105.
80. Korkin S.V., Lyapustin A.I., Rozanov V.V. Analysis of the radiative transfer equation with highly assymetric phase function // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2011. — Vol. 112, no. 10. — P. 1595–1608.
81. Будак В.П., Шагалов О.В., Kokhanovsky A.A. Об использовании метода синтетических итераций в задачах оптики атмосферы // Труды конференции ISARD-2013. Петергоф. — 2013.
82. Budak V.P., Shagalov O.V. Solution Convergence Acceleration of Discretized Radiative Transfer Equation Using Synthetic Iteration Method // *ICHMT Digital Library: Proceedings of RAD-13 – 7th International Symposium on Radiative Transfer*. — 2014. — Access mode: <http://www.ichmt.org/rad-13/images/abstracts/rad-13-rm1.pdf>.
83. Spurr R.J.D., Kurosu T.P., Chance K.V. A linearized discrete ordinate radiative transfer model for atmospheric remote-sensing retrieval // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2001. — Vol. 68, no. 6. — P. 689–735.
84. Kopp H.J. Synthetic Method Solution of the Transport Equation // *Nucl Sci Eng*. — 1963. — Vol. 17. — P. 65–74.
85. Larsen E.W., Miller W.E. A Two-Step Acceleration Method for Transport Problems // *Trans Am Nucl Soc*. — 1986. — Vol. 52. — P. 416–417.

86. A Hotteling transformation approach for rapid inversion of atmospheric spectra / P. Eriksson, C. Jimenez, S. Buhler, D. Murtagh // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2002. — Vol. 73, no. 6. — P. 529–543.
87. Liu Q., Weng F. Advanced doubling-adding method for radiative transfer in planetary atmosphere // *J Atmos Sci*. — 2006. — Vol. 63, no. 12. — P. 3459–3465.
88. Spurr R.J.D. *LIDORT and VLIDORT. Linearized pseudo-spherical scalar and vector discrete ordinate radiative transfer models for use in remote sensing retrieval problems* // *Light scattering reviews* / Ed. by A.A. Kokhanovsky. — 2008. — Vol. 3. — P. 229–275.
89. Kokhanovsky A.A., Rozanov V.V. The reflection function of optically thick weakly absorbing turbid layers: a simple approximation // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2003. — Vol. 77, no. 2. — P. 165–175.
90. Kokhanovsky A.A., Rozanov V.V. The physical parameterization of the top-of-atmosphere reflection function for a cloudy atmosphere – underlying surface system: the oxygen A-band case study // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2004. — Vol. 85, no. 1. — P. 35–55.
91. Kokhanovsky A.A. Reflection of light from nonabsorbing semi-infinite cloudy media: a simple approximation // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2004. — Vol. 85, no. 1. — P. 25–33.
92. Математическая энциклопедия. Том 5 / Под ред. И.М. Виноградова. — Советская энциклопедия, 1985.
93. Doicu A., Schreier F., Hess M. Iteratively regularized Gauss–Newton method for atmospheric remote sensing // *Comp Phys Comm*. — 2002. — Vol. 148, no. 2. — P. 214–226.
94. An efficient inversion algorithm for atmospheric remote sensing with application to UV limb observations / A. Doicu, F. Schreier, S. Hilgers et al. // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2007. — Vol. 103, no. 1. — P. 193–208.
95. Griewank A. On automatic differentiation. Preprint ANL/MCS-P10-1088. — Argonne National Laboratory. Mathematics and Computer Science Division., 1989. — Access mode: <http://softlib.rice.edu/pub/CRPC-TRs/reports/CRPC-TR89003.pdf>.
96. Griewank A. *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*. — SIAM, Philadelphia, PA., 2000.
97. Schreier F., Schimpf B. A new efficient line-by-line code for high resolution atmospheric radiation computations incl. derivatives // *IRS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation* / Ed. by W. L. Smith, Y. Timofeyev. — 2001. — P. 381–384.

98. Schreier F., Boettger U. MIRART, a line-by-line code for infrared atmospheric radiation computations incl. derivatives // Atmos Ocean Optics. — 2003. — Vol. 16. — P. 262–268.
99. Doicu A., Trautmann T. Two linearization methods for atmospheric remote sensing // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2009. — Vol. 110, no. 8. — P. 477–490.
100. Simultaneous retrieval of aerosols and ocean properties: A classic inverse modeling approach. I. Analytic Jacobians from the linearized CAO-DISORT model / R. Spurr, K. Stamnes, H. Eide et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2007. — Vol. 104, no. 3. — P. 428–449.
101. Ten years of GOME/ERS2 total ozone data—The new GOME data processor (GDP) version 4.2. Ground-based validation and comparisons with TOMS V7/V8 / D. Balis, J.-C. Lambert, M. Van Roozendael et al. // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 2007. — Vol. 112, no. D7. — P. D07307.
102. Global Patterns in Daytime Cloud Properties as derived from GOME Backscatter UV-VIS Measurements / R.D.G. Loyola, W. Thomas, R. Spurr, B. Mayer // [Int J Remote Sensing](#). — 2010. — Vol. 31, no. 16. — P. 4295–4318.
103. Homogenized total ozone data records from the European sensors GOME/ERS-2, SCIAMACHY/Envisat, and GOME-2/MetOp-A / C. Lerot, M. Van Roozendael, R. Spurr et al. // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 2014. — Vol. 119, no. 3. — P. 1639–1662.
104. Sensitivity of trace gas abundances retrievals from infrared limb emission spectra to simplifying approximations in radiative transfer modelling / G.P. Stiller, T. Clarmann, B. Funke et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2002. — Vol. 72, no. 3. — P. 249–280.
105. Moliere (v5): A versatile forward- and inversion model for the millimeter and sub-millimeter wavelength range / J. Urban, P. Baron, N. Lautie et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2004. — Vol. 83, no. 3-4. — P. 529–554.
106. Кадомцев Б.В. О функции влияния в теории переноса лучистой энергии // ДАН СССР. — 1957. — Т. 113, № 3. — С. 541–543.
107. Bell G.I., Glasstone S. Nuclear reactor theory. — Van Nostrand Reinhold, New York, 1970.
108. Марчук Г.И. Уравнение для ценности информации с метеорологических спутников и постановка обратных задач // Космические исследования. — 1964. — Т. 2(3). — С. 462–477.
109. Box M.A. Radiative perturbation theory: A review // [Environ Modelling Software](#). — 2002. — Vol. 17, no. 1. — P. 95–106.

110. Ustinov E.A. Atmospheric weighting functions and surface partial derivatives for remote sensing of scattering planetary atmospheres in thermal spectral region: General adjoint approach // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2005. — Vol. 92, no. 3. — P. 351–371.
111. Rozanov V.V., Rozanov A.V. Relationship between different approaches to derive weighting functions related to atmospheric remote sensing problems // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2007. — Vol. 105, no. 2. — P. 217–242.
112. A linearized radiative transfer model for ozone profile retrieval using the analytical forward-adjoint perturbation theory approach / J. Landgraf, O.P. Hasekamp, M.A. Box, T. Trautmann // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 2001. — Vol. 106, no. D21. — P. 27291–27305.
113. Walter H., Landgraf J., Hasekamp O.P. Linearization of a pseudo-spherical vector radiative transfer model // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2004. — Vol. 85, no. 3–4. — P. 251–283.
114. Walter H.H., Landgraf J. [Linearization of radiative transfer in spherical geometry: an application of the forward-adjoint perturbation theory](#) // Light scattering reviews / Ed. by A.A. Kokhanovsky. — Springer Berlin Heidelberg, 2010. — Vol. 5. — P. 105–146.
115. Роговцов Н.Н., Самсон А.М. Интегральные соотношения и величины в теории многократного рассеяния света в однородных и неоднородных средах. — Препринт / Ин-т физики АН Белорус. ССР ; № 91. Минск, 1975.
116. Роговцов Н.Н. Перенос излучения в рассеивающих поглощающих средах различной конфигурации: Диссертация на соискание ученой степени д-ра физ.-мат. наук; Белорус. гос. политехн. акад. — Минск: Б.и., 1994.
117. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация / А.Н. Тихонов, А.В. Гончарский, В.В. Степанов, А.Г. Ягола. — М.: Наука, 1983.
118. Steck T. Methods for determining regularization for atmospheric retrieval problems // [Appl Opt](#). — 2002. — Vol. 41, no. 9. — P. 1788–1797.
119. Rodgers C.D. Inverse methods for atmospheric sounding: Theory and Practice. — World Scientific Publishing, 2000.
120. Doicu A., Trautmann T., Schreier F. Numerical Regularization for Atmospheric Inverse Problems. — Springer, 2010.
121. Doicu A., Schussler O., Loyola D. Constrained regularization methods for ozone profile retrieval from UV/VIS nadir spectrometers // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2010. — Vol. 111, no. 6. — P. 907–916.

122. Farman J. C., Gardiner B. G., Shanklin J. D. Large losses of total ozone in Antarctica reveal seasonal ClO_x/NO_x interaction // [Nature](#). — 1985. — May. — Vol. 315, no. 6016. — P. 207–210.
123. World Meteorological Organization. Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2006, Global Ozone Research and Monitoring Project – Report No. 50. — WMO, Geneva, Switzerland, 2007.
124. World Meteorological Organization. Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2010, Global Ozone Research and Monitoring Project – Report No. 52. — WMO, Geneva, Switzerland, 2011.
125. Хвостиков И.А. Очерки по физике земной атмосферы // Успехи физических наук. — 1938. — Т. 19, № 2. — С. 145–194.
126. Handbook of Atmospheric Science: Principles and Applications / Ed. by C.N. Hewitt, A.V. Jackson. — Blackwell Publishing, 2003.
127. Тимофеев Ю.М., Шульгина Е.М. Российские исследования в области атмосферной радиации в 2007–2010 гг // [Известия РАН. Физика атмосферы и океана](#). — 2013. — Т. 49, № 1. — С. 19–36.
128. Dobson G.M.B., Harrison D.N. Measurements of the amount of ozone in the earth's atmosphere and its relation to other geophysical conditions, Part 1. // Proc R Soc London. — 1926. — Vol. 110. — P. 660–693.
129. Platt U., Perner D. [Measurements of atmospheric trace gases by long path differential UV/visible absorption spectroscopy](#) // Optical and Laser Remote Sensing / Ed. by D.A. Killinger, A. Mooradian. — Springer Berlin Heidelberg, 1983. — Vol. 39. — P. 95–105.
130. Differential optical absorption spectroscopy (DOAS) system for urban atmospheric pollution monitoring / H. Edner, P. Ragnarson, S. Spaennare, S. Svanberg // [Appl Opt](#). — 1993. — Vol. 32, no. 3. — P. 327–333.
131. Platt U. Differential optical absorption spectroscopy (DOAS) // Chem Anal Series. — 1994. — Vol. 127. — P. 27–83.
132. Total ozone retrieval from GOME UV spectral data using the weighting function DOAS approach / M. Coldewey-Egbers, M. Weber, L.N. Lamsal et al. // [Atmos Chem Phys](#). — 2005. — Vol. 5. — P. 1015–1025.
133. Platt U., Stutz J. Differential Optical Absorption Spectroscopy: Principles and Applications. — Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2008.

134. Gotz F. W. P., Meetham A. R., Dobson G. M. B. The Vertical Distribution of Ozone in the Atmosphere // [Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences](#). — 1934. — jul. — Vol. 145, no. 855. — P. 416–446.
135. Hasecamp O.P., Landgraf J. Ozone profile retrieval from backscattered ultraviolet radiances: The inverse problem solved by regularization // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 2012. — Vol. 106, no. D8. — P. 8077–8088.
136. Retrieval of vertical profiles of ozone from high-resolution infrared solar spectra at Rikubetsu, Japan / H. Nakajima, X. Liu, I. Murata et al. // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 1997. — Vol. 102, no. D25. — P. 29981–29990.
137. Retrieval of ozone and nitrogen dioxide concentrations from Stratospheric Aerosol and Gas Experiment III (SAGE III) measurements using a new algorithm / A.V. Polyakov, Y.M. Timofeyev, D.V. Ionov et al. // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 2005. — Vol. 110. — P. D06303:1–15.
138. Виролайнен Я.А., Тимофеев Ю.М. Определение элементов вертикальной структуры содержания озона из наземных измерений солнечного излучения с высоким спектральным разрешением // Исследования Земли из космоса. — 2008. — Т. 3. — С. 1–8.
139. Наземные измерения общего содержания озона ИК-методом / Я.А. Виролайнен, Ю.М. Тимофеев, Д.В. Ионов и др. // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. — 2011. — Т. 47, № 4. — С. 521–532.
140. Соломонов С.В., Кропоткина Е.П., Розанов С.Б. Исследование вертикального распределения озона в стратосфере и мезосфере на миллиметровых волнах // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. — 2003. — Т. 46. № 8-9. — С. 764–770.
141. Спектральная аппаратура для мониторинга атмосферного озона на миллиметровых волнах / С.В. Соломонов, А.Н. Игнатьев, Е.П. Кропоткина и др. // Приборы и техника эксперимента. — 2009. — Т. 2. — С. 138–144.
142. Дистанционное зондирование атмосферного озона на миллиметровых волнах / С.В. Соломонов, К.П. Гайкович, Е.П. Кропоткина и др. // Известия высших учебных заведений. Радиофизика. — 2011. — Т. 54. № 02. — С. 113–122.
143. Исследование изменений содержания озона в верхней стратосфере методами спектроскопии миллиметровых волн / С.В. Соломонов, Е.П. Кропоткина, А.Н. Игнатьева и др. // Краткие сообщения по физике физического института им. П.Н. Лебедева РАН. — 2012. — Т. 3. — С. 3–13.
144. Calculation of undersampling correction spectra for DOAS spectral fitting / Sander Slijkhuis, Albrecht von Bargaen, Werner Thomas, Kelly Chance // Proc. ESAMS'99-European

Symposium on Atmospheric Measurements from Space. — 1999. — P. 563–569. — Access mode: http://wdc.dlr.de/sensors/gome/gdp4/slijkhuis_1999.pdf.

145. Analysis for BrO in zenith-sky spectra: An intercomparison exercise for analysis improvement / S. R. Aliwell, M. Van Roozendael, P. V. Johnston et al. // [Journal of Geophysical Research: Atmospheres](#). — 2002. — Vol. 107, no. D14. — P. ACH 10–1–ACH 10–20.
146. Stratospheric profiles of nitrogen dioxide observed by Optical Spectrograph and Infrared Imager System on the Odin satellite / Christopher E. Sioris, Craig S. Haley, Chris A. McLinden et al. // [Journal of Geophysical Research: Atmospheres](#). — 2003. — Vol. 108, no. D7. — P. 4215(1–19). — 4215.
147. Dobson G.M.B. Forty Yeras' Research on Atmospheric Ozone at Oxford: a History // [Appl Opt](#). — 1968. — Vol. 7. — P. 387–405.
148. Schwartz S.E., Warneck P. Units for use in atmospheric chemistry // *Pure Appl Chem*. — 1995. — Vol. 67. — P. 1377–1406.
149. McNaught A.D., Wilkinson A. IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book"). — Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1997.
150. McPeters R.D. Nimbus–7 Total Ozone Mapping Spectrometer (TOMS) Data Products User's Guide. — NASA, Scientific and Technical Information Branch, USA, 1996.
151. Sixteen years of GOME/ERS2 total ozone data: the new direct-fitting GOME Data Processor (GDP) Version 5: I. algorithm description / V.M. Roozendael, R. Spurr, D. Loyola et al. // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 2012. — Vol. 117. — P. D03305(1–18).
152. Grainger J.F., Ring J. Anomalous Fraunhofer line profiles // [Nature](#). — 1962. — Vol. 193. — P. 762.
153. Brinkmann R.T. Rotational Raman scattering in planetary atmospheres // [Astrophys J](#). — 1968. — Vol. 154. — P. 1087–1093.
154. Kattawar G.W., Young A.T., Humphreys T.J. Inelastic scattering in planetary atmospheres. I. The Ring effect, without aerosols // [Astrophys J](#). — 1981. — Vol. 243. — P. 1049–1057.
155. Noxon J. F., Whipple E. C., Hyde R. S. Stratospheric NO₂: 1. Observational method and behavior at mid-latitude // [J Geophys Res: Oceans](#). — 1979. — Vol. 84, no. C8. — P. 5047–5065.
156. Solomon S., Schmeltekopf A.L., Sanders R.W. On the interpretation of zenith sky absorption measurements // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 1987. — Vol. 92, no. D7. — P. 8311–8319.

157. Vountas M., Rozanov V.V., Burrows J.P. Ring effect: Impact of rotational Raman scattering on radiative transfer in earth's atmosphere // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1998. — Vol. 60, no. 6. — P. 943–961.
158. Aben I., Stam D.M., Helderma F. The Ring effect in skylight polarisation // [Geophys Res Lett](#). — 2001. — Vol. 28, no. 1. — P. 519–522.
159. Rotational Raman scattering of polarized light in the Earth atmosphere: A vector radiative transfer model using the radiative transfer perturbation theory approach / J. Landgraf, O. Hasekamp, R. Van Deelen, I. Aben // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2004. — Vol. 87, no. 3–4. — P. 399–433.
160. Rozanov V.V., Vountas M. Radiative transfer equation accounting for rotational Raman scattering and its solution by the discrete-ordinates method // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2014. — Vol. 133. — P. 603–618.
161. Chance K. Analysis of BrO measurements from the Global Ozone Monitoring Experiment // [Geophys Res Lett](#). — 1998. — Vol. 25, no. 17. — P. 3335–3338.
162. Mishchenko M.I., Lacis A.A., Travis L.D. Errors induced by the neglect of polarization in radiance calculations for rayleigh-scattering atmospheres // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1994. — Vol. 51, no. 3. — P. 491–510.
163. Modeling Errors in diffuse-sky radiation: vector vs. scalar treatment / A.A. Lacis, J. Chowdhary, M.I. Mishchenko, B. Cairns // [Geophys Res Lett](#). — 1998. — Vol. 25, no. 2. — P. 135–138.
164. Sromovsky L.A. Effects of Rayleigh-scattering polarization on reflected intensity: a fast and accurate approximation method for atmospheres with aerosols // [Icarus](#). — 2005. — Vol. 173, no. 1. — P. 284–294.
165. Коркин С.В. Математическая модель отражения поляризованного излучения при дистанционном зондировании мутных сред – Диссертация на соискание ученой степени к.т.н. — М., МЭИ, 2009.
166. Hasekamp O.P., Landgraf J., Oss R. The need of polarization modeling for ozone profile retrieval from backscattered sunlight // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 2002. — Vol. 107, no. D23. — P. ACL 13–1–ACL 13–16.
167. Björck Ake. Numerical Methods for least squares problems. — SIAM: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1996. — P. 408.
168. Fletcher R. Practical Methods of Optimization. — Wiley, New York, 1988.
169. Nocedal J., Wright S.J. Numerical Optimization. — Springer-Verlag, New York, 1999.

170. Statistically optimized inversion algorithm for enhanced retrieval of aerosol properties from spectral multi-angle polarimetric satellite observations / O. Dubovik, M. Herman, A. Holdak et al. // [Atmospheric Measurement Techniques](#). — 2011. — Vol. 4, no. 5. — P. 975–1018.
171. Gill P.E., Murray W., Wright M. Practical Optimization. — Emerald Group Publishing Limited, 1982.
172. Раутиан С. Г. Реальные спектральные приборы // Успехи физических наук. — 1958. — Т. 66. — С. 475–517.
173. Пытьев Ю.П. Математические методы интерпретации эксперимента. — М.: Высшая школа, 1989.
174. The Landsat Scale Break in Stratocumulus as a Three-Dimensional Radiative Transfer Effect: Implications for Cloud Remote Sensing / A. Davis, A. Marshak, R. Cahalan, W. Wiscombe // [J Atmos Sci](#). — 1997. — Vol. 54. — P. 241–260.
175. Davis A.B., Marshak A. Multiple scattering in clouds: Insights from three-dimensional diffusion/ P_1 theory // Nucl Sci Eng. — 2001. — Vol. 137. — P. 251–280.
176. Chambers L. H., Wielicki B. A., Evans K. F. Accuracy of the independent pixel approximation for satellite estimates of oceanic boundary layer cloud optical depth // [J Geophys Res](#). — 1997. — Vol. 102, no. D2. — P. 1779–1794.
177. Zuidema P., Evans K.F. On the validity of the independent pixel approximation for boundary layer clouds observed during ASTEX // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 1998. — Vol. 103, no. D6. — P. 6059–6074.
178. On the accuracy of the independent pixel approximation in 3d radiative transfer / M. Schewski, A. Macke, R. Scheirer, T. Jung // RS 2000: Current Problems in Atmospheric Radiation / Ed. by V.L. Smith, Y.M. Timofeyev. — Hampton, Virginia: A. Deepak Publishing, 2001. — P. 249–252.
179. Evaluation of cloud fraction and its radiative effect simulated by IPCC AR4 global models against ARM surface observations / Y. Qian, C. N. Long, H. Wang et al. // [Atmos Chem Phys](#). — 2012. — Vol. 12, no. 4. — P. 1785–1810.
180. Kennedy A.D., Dong X., Xi B. Cloud fraction at the ARM SGP site // [Theoretical and Applied Climatology](#). — 2014. — Vol. 115, no. 1-2. — P. 91–105.
181. The influence of broken cloudiness on cloud top height retrievals using nadir observations of backscattered solar radiation in the oxygen A-band / A.A. Kokhanovsky, B. Mayer, V.V. Rozanov et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2007. — Vol. 103, no. 3. — P. 460–477.

182. Requirements for the GMES Atmosphere Service and ESA's implementation concept: Sentinels-4/-5 and -5p / P. Ingmann, B. Veihelmann, J. Langen et al. // [Remote Sensing of Environment](#). — 2012. — Vol. 120. — P. 58–69. — The Sentinel Missions - New Opportunities for Science.
183. Cairns B., Lacis A.A., Carlson B.E. Absorption within inhomogeneous clouds and its parameterization in general circulation models // [J Atmos Sci](#). — 2000. — Vol. 57. — P. 700–714.
184. Kuze Akihiko, Chance Kelly V. Analysis of cloud top height and cloud coverage from satellites using the O 2 A and B bands // [Journal of Geophysical Research](#). — 1994. — Vol. 99, no. D7. — P. 14481. — Access mode: <http://dx.doi.org/10.1029/94JD01152>.
185. A fast method for retrieval of cloud parameters using oxygen A band measurements from the Global Ozone Monitoring Experiment / R. B. A. Koelemeijer, P. Stammes, J. W. Hovenier, J. F. de Haan // [Journal of Geophysical Research](#). — 2001. — Feb. — Vol. 106, no. D4. — P. 3475.
186. Information Content in the Oxygen A-Band for the Retrieval of Macrophysical Cloud Parameters / Olena Schuessler, Diego Guillermo Loyola Rodriguez, Adrian Doicu, Robert Spurr // [IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing](#). — 2014. — Jun. — Vol. 52, no. 6. — P. 3246–3255.
187. Evans K.F. The spherical harmonic discrete ordinate method for three-dimensional atmospheric radiative transfer // [J Atmos Sci](#). — 1998. — Vol. 55, no. 3. — P. 429–446.
188. Долин Л.С. О стохастизации поля излучения в среде с флуктуирующим коэффициентом экстинкции // *ДАН СССР*. — 1984. — Т. 277. №1. — С. 77–80.
189. Вебер В.Л., Долин Л.С. О флуктуациях изображений при наблюдении через случайно-неровную нестационарную границу раздела // *Изв. АН СССР. Сер. ФАО*. — 1981. — Т. 17. №11. — С. 1166–1177.
190. Лучинин А.Г. О некоторых свойствах оптической передаточной функции взволнованной морской поверхности // *Изв. АН СССР. Сер. ФАО*. — 1982. — Т. 18. N3. — С. 330–333.
191. Kargin B.A. [Statistical modeling of stochastic problems of the atmosphere and ocean optics](#) // Seventh International Symposium on Atmospheric and Ocean Optics / Ed. by G.G. Matvienko, M.V. Panchenko. — SPIE-Intl Soc Optical Eng, 2000. — dec.
192. Prigarin S.M., Kargin B.A., Oppel U.G. Random fields of broken clouds and their associated direct solar radiation, scattered transmission and albedo // [Pure Appl. Opt.](#) — 1998. — nov. — Vol. 7, no. 6. — P. 1389–1402.

193. Anisimov O., Fukshansky L. Stochastic radiation in macroheterogeneous random optical media // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1992. — Vol. 48, no. 2. — P. 169–186.
194. Avaste O., Vainikko G. Calculation of the mean values of the intensities and fluxes in broken clouds // IAMAP/IAGA International Union of Geodesy and Geophysics, XV General Assembly. — M., 1971. — P. 24.
195. Вайникко Г.М. Уравнения средней интенсивности излучения в разорванной облачности // Тр. МГК СССР. Метеорологические исследования. — 1973. — Т. 21. — С. 28–37.
196. Вайникко Г.М. Транспортное приближение к средней интенсивности излучения в разорванной облачности // Тр. МГК СССР. Метеорологические исследования. — 1973. — Т. 21. — С. 38–51.
197. Vanderhaegen D. Radiative transfer in statistically heterogeneous mixtures // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1986. — Vol. 36, no. 6. — P. 557–561.
198. Levermore C.D., Wong J., Pomraning G.C. Renewal theory for transport processes in binary statistical mixtures // [J Math Phys](#). — 1988. — Vol. 29. — P. 995–1004.
199. Pomraning G.C. Statistics, renewal theory and particle transport // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1989. — Vol. 42, no. 4. — P. 279–293.
200. Deutsch C., Vanderhaegen D. Radiative transfer in statistically heterogeneous mixtures // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1990. — Vol. 44, no. 1. — P. 163–169.
201. Pomraning G.C. A model for interface intensities in stochastic particle transport // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1991. — Vol. 46. — P. 221–236.
202. Тихонов В.И., Миронов М.А. Марковские процессы. — М., «Сов. радио», 1977.
203. Adams M.L., Larsen E.W., Pomraning G.C. Benchmark results for particle transport in a binary Markov statistical medium // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1989. — Vol. 42, no. 4. — P. 253–266.
204. Sahini D.C. Equivalence of generic equation method and the phenomenological model for linear transport problem in a two-state random scattering medium // [J Math Phys](#). — 1989. — Vol. 30. — P. 1554–1559.
205. Sahini D.C. An application of reactor noise techniques to neutron transport problems in a random medium // [Ann Nucl Energy](#). — 1989. — Vol. 16. — P. 397–408.
206. Stochastic radiative transfer in a partially cloudy atmosphere / F. Malvagi, N. Byrne, G.C. Pomraning, R.C.J. Somerville // [J Atmos Sci](#). — 1993. — Vol. 50, no. 14. — P. 2146–2158.

207. Byrne R.N., Somerville R.C.J., Subasilar B. Broken-cloud enhancement of solar radiation absorption // [J Atmos Sci.](#) — 1996. — Vol. 53, no. 6. — P. 878–886.
208. Titov G.A. Statistical description of radiative transfer in clouds // [J Atmos Sci.](#) — 1990. — Vol. 47, no. 1. — P. 24–38.
209. Титов Г.А., Журавлева Т.Б. Сравнение двух методов расчета средних потоков солнечной радиации в двухслойной разорванной облачности (видимый диапазон) // Оптика атмосферы и океана. — 1999. — Т. 12. — С. 207–214.
210. Kassianov E. Stochastic radiative transfer in multilayer broken clouds. Part I: Markovian approach // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer.](#) — 2003. — Vol. 77, no. 4. — P. 373–393.
211. Titov G.A., Zhuravleva T.B., Zuev V.E. Mean radiation fluxes in the near-IR spectral range: Algorithms for calculation // [Journal of Geophysical Research: Atmospheres.](#) — 1997. — jan. — Vol. 102, no. D2. — P. 1819–1832.
212. Lane D.E., Goris K., Somerville R.C.J. Radiative Transfer through Broken Clouds: Observations and Model Validation // [Journal of Climate.](#) — 2002. — oct. — Vol. 15, no. 20. — P. 2921–2933.
213. Метод характеристик в задачах атмосферной оптики / Т.А. Сушкевич, С.А. Стрелков, А.А. Иолтуховский, В.М. Масленников. — Наука, 1990. — ISBN: [9785020008038](#).
214. [Radiative transfer in horizontally and vertically inhomogeneous turbid media](#) / O.V. Nikolaeva, L.P. Bass, T.A. Germogenova et al. // Light scattering reviews / Ed. by A.A. Kokhanovsky. — Springer Berlin Heidelberg, 2007. — Vol. 2. — P. 295–348.
215. The influence of neighboring clouds on the clear sky reflectance studied with the 3-D transport code RADUGA / O.V. Nikolaeva, L.P. Bass, T.A. Germogenova et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer.](#) — 2005. — Vol. 94, no. 3–4. — P. 405–424.
216. Trasi N.S., Oliveira C.R.E., Haigh J.D. A finite element-spherical harmonics model for radiative transfer in inhomogeneous clouds: part I. The EVENT model // [Atmos Res.](#) — 2004. — Vol. 72. — P. 197–221.
217. Lathrop K.D. Spatial differencing of the two-dimensional transport equation // Report GA-8746, Gulf General Atomic. — 1968.
218. Wendroff B. A difference scheme for radiative transfer // [J Comput Phys.](#) — 1969. — Vol. 4, no. 2. — P. 211–229.
219. Lathrop K.D. Spatial differencing of the transport equation positivity vs. accuracy // [J Comput Phys.](#) — 1969. — Vol. 4, no. 4. — P. 475–498.

220. Larsen E.W., Alcouffe R.E. The linear characteristic method for spatially discretizing the discrete ordinates equations in (x,y)-geometry // Proceedings of the international meeting on advances in mathematical methods for the solution of nuclear engineering problems. — Munich, 1981. — P. 91.
221. Gopinath D.V., Natarajan A., Sundararaman V. Improved interpolation schemes in anisotropic source-flux iteration techniques // Nucl Sci Eng. — 1980. — Vol. 75. — P. 181–184.
222. Gelbard E.M., Davis J.A., Hageman L.A. Solution of the discrete ordinate equations in one and two dimensions // USAEC Report WAPD-T-2028, Bettis Atomic Power Laboratory. — 1967.
223. Takeuchi K. Numerical solution to space-angle energy-dependent neutron integral transport equation // *J Nucl Sci Technol*. — 1971. — Vol. 8, no. 3. — P. 141–152.
224. Kunasz P., Auer L.H. Short characteristic integration of radiative transfer problems: formal solution in two-dimensional slabs // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 1988. — Vol. 39, no. 1. — P. 67–79.
225. THE I3RC: Bringing Together the Most Advanced Radiative Transfer Tools for Cloudy Atmospheres / R.F. Cahalan, L. Oreopoulos, A. Marshak et al. // *Bull Am Meteorol Soc*. — 2005. — Vol. 86, no. 9. — P. 1275–1293.
226. Evans K.F., Wiscombe W.J. Improvements to the SHDOM Radiative Transfer Modeling Package // Thirteenth ARM Science Team Meeting Proceedings. — 2003. — P. 1–6. — Access mode: http://nit.colorado.edu/shdom/ARM2003_SHDOM.pdf.
227. Pincus R., Evans K.F. Computational cost and accuracy in calculating three-dimensional radiative transfer: Results for new implementations of Monte Carlo and SHDOM // *J Atmos Sci*. — 2009. — Vol. 66, no. 10. — P. 3131–3146.
228. Monte Carlo method and sensitivity estimations / A. Lataillade, S. Blanco, Y. Clergent et al. // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2002. — Vol. 75, no. 5. — P. 529–538.
229. Haferman J.L., Smith T.F., Krajewski W.F. A multi-dimensional discrete-ordinates method for polarised radiative transfer. Part 1: Validation for randomly oriented axisymmetric particles // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 1997. — Vol. 58, no. 3. — P. 379–398.
230. A polarized discrete ordinate scattering model for simulations of limb and nadir longwave measurements in 1D/3D spherical atmospheres / C. Emde, S.A. Buehler, C. Davis et al. // *J Geophys Res: Atmospheres*. — 2004. — Vol. 109, no. D24. — P. D24207(1–20).

231. Roberti L., Kummerow C. Monte Carlo calculations of polarized microwave radiation emerging from cloud structures // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 1999. — Vol. 104, no. D2. — P. 2093–2014.
232. Liu Q., Simmer C., Ruprecht E. Three-dimensional radiative transfer effects of clouds in the microwave spectral range // [J Geophys Res: Atmospheres](#). — 1996. — Vol. 101. — P. 4289–4298.
233. The impact of aerosols on polarized sky radiance: model development, validation, and applications / C. Emde, R. Buras, B. Mayer, M. Blumthaler // [Atmos Chem Phys](#). — 2010. — Vol. 10. — P. 383–396.
234. Waterman P.C. Matrix-exponential description of radiative transfer // [J Opt Soc Am.](#) — 1981. — Vol. 71, no. 4. — P. 410–22.
235. Nakajima T., Tanaka M. Matrix formulations for the transfer of solar radiation in a plane-parallel scattering atmosphere // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1986. — Vol. 35, no. 1. — P. 13–21.
236. Stamnes K., Swanson R.A. A New Look at the Discrete Ordinate Method for Radiative Transfer Calculations in Anisotropically Scattering Atmospheres // [J Atmos Sci](#). — 1981. — Vol. 38, no. 2. — P. 387–389.
237. Stamnes K., Tsay S.C., Nakajima T. Computation of eigenvalues and eigenvectors for the discrete ordinate and matrix operator methods in radiative transfer // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1988. — Vol. 39, no. 5. — P. 415–419.
238. Grant I.P., Hunt G.E. Discrete Space Theory of Radiative Transfer. I. Fundamentals // [Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences](#). — 1969. — oct. — Vol. 313, no. 1513. — P. 183–197.
239. Plass G.N., Kattawar G.W., Catchings F.E. Matrix Operator Theory of Radiative Transfer 1: Rayleigh Scattering // [Appl. Opt.](#) — 1973. — feb. — Vol. 12, no. 2. — P. 314.
240. de Haan J. F., Bosma P.B., Hovenier J. W. The adding method for multiple scattering calculations of polarized light. — 1987. — Vol. 183, no. 2. — P. 371–391.
241. Voronovich A.G., Gasiewski A.J., Weber B.L. A fast multistream scattering-based Jacobian for microwave radiance assimilation // [IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing](#). — 2004. — Aug. — Vol. 42, no. 8. — P. 1749–1761.
242. Spurr R.J.D., Christi M.J. Linearization of the interaction principle: Analytic Jacobians in the "Radiant model-// [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2007. — Vol. 103, no. 3. — P. 431–446.

243. Doicu A., Trautmann T. Discrete-ordinate method with matrix exponential for a pseudo-spherical atmosphere: Vector case // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2009. — Vol. 110, no. 1-2. — P. 159–172.
244. Bellman R., Kalaba R., Wing G.M. Invariant imbedding and mathematical physics-I: Particle processes // [J. Math. Phys.](#) — 1960. — Vol. 1. — P. 280–308.
245. Flatau P.J., Stephens G.L. On the fundamental solution of the radiative transfer equation // [J. Geophys. Res.](#) — 1988. — Vol. 93, no. D9. — P. 11037.
246. Budak V.P., Klyuykov D.A., Korkin S.V. [Convergence acceleration of radiative transfer equation solution at strongly anisotropic scattering](#) // Light scattering reviews / Ed. by A.A. Kokhanovsky. — Springer Berlin Heidelberg, 2010. — Vol. 5. — P. 147–203.
247. Budak V.P., Shagalov O.V. The mathematical model of optical remote sensing system signal considering broken cloudiness effects // [ISPRS - International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences](#). — 2015. — apr. — Vol. XL-7/W3. — P. 1145–1148.
248. Goudsmit S., Saunderson J.L. Multiple scattering of electrons // [Phys Rev.](#) — 1940. — Vol. 57. — P. 24–9.
249. Буда́к В.П., Ефре́менко Д.С., Шага́лов О.В. Сравнительный анализ алгоритмов решения векторного уравнения переноса излучения по эффективности для плоского слоя мутной среды // [Оптика атмосферы и океана](#). — 2011. — Т. 24. № 12. — С. 1088–1098.
250. Karp A.H., Greenstadt J., Fillmore J.A. Radiative transfer through an arbitrarily thick, scattering atmosphere // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1980. — Vol. 24, no. 5. — P. 391–406.
251. Mayer B., Kylling A. Technical note: The libRadtran software package for radiative transfer calculations – description and examples of use // [Atmos Chem Phys Discuss.](#) — 2005. — Vol. 5. — P. 1855–1877.
252. A vector radiative-transfer model for the Odin/OSIRIS project / C.A. McLinden, J.C. McConnell, E. Griffioen, C.T. McElroy // [Canadian J Phys.](#) — 2002. — Vol. 80. — P. 375–393.
253. Doicu A., Wriedt T., Eremin Y. Light Scattering by Systems of Particles. Null-Field Method with Discrete Sources-Theory and Programs. — Berlin: Springer Verlag, 2006.
254. Evans K.F., Stephens G.L. A new polarized atmospheric radiative transfer model // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 1991. — Vol. 46, no. 5. — P. 413–423.

255. Chalhoub E.S., Garcia R.D.M. The equivalence between two techniques of angular interpolation for the discrete-ordinates method // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2000. — Vol. 64, no. 5. — P. 517–535.
256. Earth System Science Data Resources – tapping into a wealth of data, information, and services. — NASA NP-2007-11-859-GSFC. — Access mode: <http://daac.ornl.gov/ESSDR112007.pdf>.
257. Mishchenko M.I., Travis L.D. Capabilities and limitations of a current fortran implementation of the T-matrix method for randomly oriented, rotationally symmetric scatterers // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 1998. — Vol. 60. — P. 309–324.
258. Мищенко М.И. Электромагнитное рассеяние в случайных дисперсных средах: фундаментальная теория и приложения: диссертация на соискание ученой степени д.ф.-м.н. — Главная астрономическая обсерватория Украины, Национальное управление аэронавтики и исследования космического пространства США, 2007. — Режим доступа: <http://www.giss.nasa.gov/staff/mmishchenko/publications/Thesis.pdf>.
259. Mackowski D.W., Mishchenko M.I. A multiple sphere T-matrix Fortran code for use on parallel computer clusters // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 2011. — Vol. 112. — P. 2182–2192.
260. The correlated k-method for radiation calculations in nonhomogeneous atmosphere / R.M. Goody, R. West, L. Chen, D. Crisp // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 1989. — Vol. 42, no. 6. — P. 539–550.
261. Wiscombe W.J., Evans J.W. Exponential-sum fitting of radiative transmission functions // *J Comput Phys*. — 1997. — Vol. 24, no. 4. — P. 416–444.
262. Tjemkes S.A., Schmetz J. Synthetic satellite radiances using the radiance sampling method // *J Geophys Res: Atmospheres*. — 1997. — Vol. 102, no. D2. — P. 1807–1818.
263. West R., Crisp D., Chen L. Mapping transformations for broadband atmospheric radiation calculation // *J Quant Spectrosc Radiat Transfer*. — 1990. — Vol. 43, no. 3. — P. 191–199.
264. Matricardi M. A principal component based version of the RTTOV fast radiative transfer model // *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*. — 2010. — Vol. 136. — P. 1823–1835.
265. Principal component-based radiative transfer model for hyperspectral sensors: theoretical concept / X Liu, W.L. Smith, D.K. Zhou, A. Larar // *Applied Optics*. — 2006. — Vol. 45, no. 1. — P. 201–208.

266. Natraj V. [A review of fast radiative transfer techniques](#) // Light scattering reviews / Ed. by A.A. Kokhanovsky. — Springer Berlin Heidelberg, 2013. — Vol. 8. — P. 475–504.
267. Ozone limb retrieval for the SCIAMACHY instrument / A. Doicu, B. Aberle, S. Hrechanyy et al. // 5th Atmospheric Limb Conference. — Helsinki, Finland, 2009. — P. 16–19. — Access mode: http://elib.dlr.de/64699/1/Doicu_17Nov09.pdf.
268. Application of the principal component analysis to high spectral resolution radiative transfer: A case study of the O₂ A-band / V. Natraj, X. Jiang, R.L. Shia et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2005. — Vol. 95, no. 4. — P. 539–556.
269. Natraj V., Shia R.L., Yung Y.L. On the use of principal component analysis to speed up radiative transfer calculations // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2010. — Vol. 111, no. 5. — P. 810–816.
270. Linearization of the Principal Component Analysis method for radiative transfer acceleration: Application to retrieval algorithms and sensitivity studies / R. Spurr, V. Natraj, C. Lerot et al. // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2013. — Vol. 125. — P. 1–17.
271. Tenenbaum J.B., de Silva V., Langford J.C. A Global Geometric Framework for Nonlinear Dimensionality Reduction // [Science](#). — 2000. — December. — Vol. 290, no. 22. — P. 2319–2323.
272. Pearson K. On lines and planes of closest fit to systems of points in space // [Phil Mag.](#) — 1901. — Vol. 2, no. 6. — P. 559–572.
273. Jolliffe I.T. Principal Component Analysis. — Berlin: Springer-Verlag, 1986.
274. Trefethen L., Bau III D. Numerical linear algebra. — SIAM, Philadelphia, PA., 1997.
275. Min W., Lu K., He X. Locality pursuit embedding // [Pattern Recognition](#). — 2004. — Vol. 37, no. 4. — P. 781–88.
276. He X., Niyogi P. Locality Preserving Projections, Department of Computer Science, The University of Chicago. — Access mode: www.cmlab.csie.ntu.edu.tw/~cyu/learning/papers/LPP_NIPS03.pdf.
277. Fu Y., Huang T.S. Locally linear embedded eigenspace analysis, Beckman Institute for Advanced Science and Technology, University of Illinois at Urbana-Champaign. — 2005. — Access mode: <http://www3.ece.neu.edu/~yunfu/papers/LEA-Yun05.pdf>.
278. Roweis S.T., Saul L.K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding // [Science](#). — 2000. — December. — Vol. 290, no. 22. — P. 2323–2326.

279. Kerschen G., Golinval J.C. Non-linear generalization of principal component analysis: From a global to a local approach // [J Sound and Vibration](#). — 2002. — Vol. 254, no. 5. — P. 867–76.
280. Chen W.H., Smith C., Fralick S. A Fast Computational Algorithm for the Discrete Cosine Transform // [IEEE Transactions on Communications](#). — 1977. — Vol. 25, no. 9. — P. 1004–1009.
281. Neumann C.P., Schonbach D.I. Discrete (Legendre) orthogonal polynomials // [International Journal for Numerical Methods in Engineering](#). — 1974. — Vol. 8, no. 4. — P. 743–770.
282. Akansu A.N., Haddad R.A. Multiresolution signal decomposition: transforms, subbands, and wavelets. — Boston MA: Academic Press, 1992.
283. Mukundan R., Ong S.H., Lee P.A. Image analysis by Tchebichef moments // [IEEE Trans Image Processing](#). — 2001. — Vol. 10, no. 9. — P. 1367–77.
284. Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing (Second edition) / W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling. — New York: Cambridge University Press, 1992.
285. Cloud properties derived from GOME/ERS-2 backscatter data for trace gas retrieval / D. Loyola, W. Thomas, Y. Livschitz et al. // [IEEE Trans. Geoscience and Remote Sensing](#). — 2007. — Vol. 45, no. 9. — P. 2747–2758.
286. Loyola D. Automatic cloud analysis from polar-orbiting satellites using neural network and data fusion techniques // [International Geoscience and Remote Sensing Symposium, IEEE, Anchorage, Alaska](#). — 2004. — Vol. 4. — P. 2530–2533.
287. Spurr R., Natraj V. A linearized two-stream radiative transfer code for fast approximation of multiple-scatter fields // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2011. — Vol. 112, no. 16. — P. 2630–2637.
288. Henyey L.G., Greenstein J.L. Diffuse radiation in the galaxy // [Astrophys J](#). — 1941. — Vol. 93. — P. 70–83.
289. OpenMP Application Program Interface. Version 4.0. — 2013. — Access mode: <http://www.openmp.org/mp-documents/OpenMP4.0.0.pdf>.
290. Intel ®Math Kernel Library: Reference Manual. Intel ®MKL 11.1. — Intel Corporation, 2013. — Access mode: <http://software.intel.com/en-us/intel-mkl>.
291. LAPACK Users' Guide, Third Edition / E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof et al. — Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999.

292. ScaLAPACK Users' Guide / L.S. Blackford, J. Choi, A. Cleary et al. — Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
293. Pacheco P.S. A user's guide to MPI. — Department of Mathematics. University of San Francisco, 1998.
294. Gropp W. Tutorial on MPI: The Message-Passing Interface. — Argonne National Laboratory, 1999.
295. Gropp W., Lusk E., Skjellum A. Using MPI: Portable parallel programming with the message-passing interface. — 2 edition. — The MIT press, 1999.
296. [Cone-beam computed tomography reconstruction accelerated with CUDA](#) / Dayu Xiao, Yuhua Chen, Beibei Qian et al. // Biomedical Engineering and Informatics (BMEI), 2011 4th International Conference on. — Vol. 1. — 2011. — Oct. — P. 214–218.
297. [CUDA and OpenCL implementations of 3D CT reconstruction for biomedical imaging](#) / S. Mukherjeet, N. Moore, J. Brock, M. Leeser // High Performance Extreme Computing (HPEC), 2012 IEEE Conference on. — 2012. — Sept. — P. 1–6.
298. Riegel E., Indinger T., Adams N.A. Implementation of a Lattice-Boltzmann method for numerical fluid mechanics using the nVIDIA CUDA technology // [Computer Science - Research and Development](#). — 2009. — Vol. 23, no. 3-4. — P. 241–247.
299. Zuo W., Chen Q. Fast and informative flow simulations in a building by using fast fluid dynamics model on graphics processing unit // [Building and Environment](#). — 2010. — Vol. 45, no. 3. — P. 747 – 757.
300. Wong Un-Hong, Aoki Takayuki, Wong Hon-Cheng. Efficient magnetohydrodynamic simulations on distributed multi-GPU systems using a novel GPU Direct-MPI hybrid approach // [Computer Physics Communications](#). — 2014. — Vol. 185, no. 7. — P. 1901–1913.
301. Cook S. CUDA Programming: A Developer's Guide to Parallel Computing with GPUs. — Elsevier, Waltham, USA, 2013.
302. Mielikainen J., Huang B., Huang H.-L.A. GPU-accelerated multi-profile radiative transfer model for the infrared atmospheric sounding interferometer // [IEEE Journal of selected topics in applied earth observations and remote sensing](#). — 2011. — Vol. 4, no. 3. — P. 691–700.
303. GICUDA: A parallel program for 3D correlation imaging of large scale gravity and gravity gradiometry data on graphics processing units with CUDA / Zhaoxi Chen, Xiaohong Meng, Lianghui Guo, Guofeng Liu // [Computers & Geosciences](#). — 2012. — Vol. 46, no. 0. — P. 119 – 128.

304. GPU-accelerated MRF segmentation algorithm for SAR images / Haigang Sui, Feifei Peng, Chuan Xu et al. // [Computers & Geosciences](#). — 2012. — Vol. 43, no. 0. — P. 159 – 166.
305. CULA: hybrid GPU accelerated linear algebra routines / John R. Humphrey, Daniel K. Price, Kyle E. Spagnoli et al. // [Proc. SPIE](#). — 2010. — Vol. 7705. — P. 770502–770502–7.
306. Access mode: <http://www.culatools.com/dense/performance/>.
307. Accelerating frequency-domain diffuse optical tomographic image reconstruction using graphics processing units / J. Prakash, V. Chandrasekharan, V. Upendra, P. Yalavarthy // [J Biomedical Optics](#). — 2010. — Vol. 15, no. 6. — P. 066009–066009–9.
308. Debunking the 100X GPU vs. CPU Myth: An Evaluation of Throughput Computing on CPU and GPU / Victor W. Lee, Changkyu Kim, Jatin Chhugani et al. // [SIGARCH Comput. Archit. News](#). — 2010. — Vol. 38, no. 3. — P. 451–460.
309. Buras R., Dowling T., Emde C. New secondary-scattering correction in DISORT with increased efficiency for forward scattering // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2011. — Vol. 112, no. 12. — P. 2028–2034.
310. GPU Programming Guide: GeForce 8 and 9 Series. — NVIDIA, 2008. — Access mode: http://developer.download.nvidia.com/GPU_Programming_Guide/GPU_Programming_Guide_G80.pdf.
311. Sanders J., Kandrot E. CUDA by example: An introduction to General-Purpose GPU Programming. — Addison-Wesley, 2011.
312. Wilt N. CUDA handbook: a comprehensive guide to GPU programming. — Addison-Wesley Professional, 2013.
313. CPU/GPU computing for long-wave radiation physics on large GPU clusters / F. Lu, J. Song, X. Cao, X. Zhu // [Computers & Geosciences](#). — 2012. — Vol. 41. — P. 47–55.
314. Using general-purpose computing on graphics processing units (GPGPU) to accelerate the ordinary kriging algorithm / E. Gutiérrez de Ravé, F.J. Jiménez-Hornero, A.B. Ariza-Villaverde, J.M. Gómez-López // [Computers & Geosciences](#). — 2014. — Vol. 64, no. 0. — P. 1 – 6.
315. Cheng Tangpei. Accelerating universal Kriging interpolation algorithm using CUDA-enabled GPU // [Computers & Geosciences](#). — 2013. — Vol. 54, no. 0. — P. 178 – 183.
316. Sayre D. Is automatic "folding" of programs efficient enough to displace manual? // [Communications of the ACM](#). — 1969. — Vol. 12, no. 12. — P. 656–660.

317. Denning Peter. Before Memory Was Virtual. In the Beginning: Recollections of Software Pioneers. — George Mason University, 1997.
318. Jessen E. Die Entwicklung des virtuellen Speichers (Origin of the Virtual Memory Concept) [in German] // [Informatik-Spektrum](#). — 1996. — Vol. 19, no. 4. — P. 216–219.
319. Amdahl G. M. [Validity of the Single Processor Approach to Achieving Large Scale Computing Capabilities](#) // Proceedings of the Spring Joint Computer Conference. — AFIPS '67 (Spring). — New York, NY, USA : ACM, 1967. — April. — P. 483–485.
320. Tange O. GNU Parallel - The Command-Line Power Tool // The USENIX Magazine. — 2011. — Vol. 36, no. 1. — P. 42–47.
321. Antony Joseph, Janes P. P., Rendell A. P. [Exploring Thread and Memory Placement on NUMA Architectures: Solaris and Linux, UltraSPARC/FirePlane and Opteron/HyperTransport](#) // High Performance Computing - HiPC 2006 / Ed. by Yves Robert, Manish Parashar, Ramamurthy Badrinath, ViktorK. Prasanna. — Springer Berlin Heidelberg, 2006. — Vol. 4297 of Lecture Notes in Computer Science. — P. 338–352.
322. Drepper U. What Every Programmer Should Know About Memory. — 2007. — November. — Access mode: <http://people.freebsd.org/~lstewart/articles/cpumemory.pdf>.
323. Cahalan R.F. Bounded cascade clouds: Albedo and effective thickness // [Nonlinear Proc Geophys](#). — 1994. — Vol. 1. — P. 156–167.
324. Multifractal characterizations of intermittency in nonstationary geophysical signals and fields / A. Davis, A. Marshak, W. Wiscombe, R. Cahalan // Current topics in nonstationary analysis / Ed. by G. Trevino, J. Hardin, B. Douglas, E. Andreas. — World Scientific, Singapore, 1996. — P. 97–158.
325. Evans K.F., Wiscombe W.J. An algorithm for generating stochastic cloud fields from radar profile statistics // [Atmos Res](#). — 2004. — Vol. 72. — P. 263–289.
326. Hogan R.J., Kew S.F. A 3D stochastic cloud model for investigating the radiative properties of inhomogeneous cirrus clouds // [Quarterly J Royal Meteorol Soc](#). — 2005. — Vol. 129, no. 611. — P. 1–24.
327. Kew S. Development of a 3D fractal cirrus model and its use in investigating the impact of cirrus inhomogeneity on radiation: MSc. Dissertation. — Department of Mathematics, University of Reading, 2003. — Access mode: http://www.met.reading.ac.uk/clouds/cloudgen/sarah_kew_msc_dissertation.pdf.
328. Thermal Radiative Fluxes through Inhomogeneous Cloud Fields: A Sensitivity Study using a New Stochastic Cloud Generator / A. Benassi, F. Szczap, A. Davis et al. // [Atmos Res](#). — 2004. — Vol. 72. — P. 291–315.

329. Gabriel P.M., Evans K.F. Simple radiative transfer methods for calculating domain-averaged solar fluxes in inhomogeneous clouds // [J Atmos Sci.](#) — 1996. — Vol. 53, no. 6. — P. 858–877.
330. Stephens G.L. Radiative transfer through arbitrarily shaped optical media. Part II: Group theory and simple closures // [J Atmos Sci.](#) — 1988. — Vol. 45, no. 12. — P. 1818–1848.
331. Alexandrov M.D., Marshak A., Ackerman A.S. Cellular Statistical Models of Broken Cloud Fields. Part I: Theory // [J Atmos Sci.](#) — 2010. — Vol. 67, no. 7. — P. 2125–2151.
332. Berg Larry K., Kassianov Evgueni I. Temporal Variability of Fair-Weather Cumulus Statistics at the ACRF SGP Site // [J. Climate.](#) — 2008. — jul. — Vol. 21, no. 13. — P. 3344–3358.
333. The albedo of fractal stratocumulus clouds / R.F. Cahalan, W. Ridgway, W.J. Wiscombe et al. // [J Atmos Sci.](#) — 1994. — Vol. 51, no. 16. — P. 2434–2455.
334. Independent pixel and Monte Carlo estimates of stratocumulus albedo / R.F. Cahalan, W. Ridgway, W.J. Wiscombe et al. // [J Atmos Sci.](#) — 1994. — Vol. 51, no. 51. — P. 3776–3790.
335. Barker H.W. A parametrization for computing grid-averaged solar fluxes for inhomogeneous marine boundary layer clouds: I. Methodology and homogeneous biases // [J Atmos Sci.](#) — 1996. — Vol. 53, no. 16. — P. 2289–2303.
336. Barker H.W., Wielicki B.A., Parker L. A parametrization for computing grid-averaged solar fluxes for inhomogeneous marine boundary layer clouds: II. Validation using satellite data // [J Atmos Sci.](#) — 1996. — Vol. 53, no. 16. — P. 2304–2316.
337. Kokhanovsky A.A. The influence of horizontal inhomogeneity on radiative characteristics of clouds: an asymptotic case study // [IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing.](#) — 2003. — Vol. 41, no. 4. — P. 817–825.
338. Barker H.W., Davis A.B. [Approximation methods in atmospheric 3D radiative transfer. Part 2: Unresolved variability and climate applications](#) // 3d Radiative Transfer in Cloudy Atmospheres / Ed. by A. Marshak, A.B. Davis. — Springer Berlin Heidelberg, 2005. — Vol. 6. — P. 343–383.
339. Discrete angle radiative transfer II: Renormalization approach for homogeneous and fractal clouds / P.M. Gabriel, S.M. Lovejoy, A. Davis et al. // [J Geophys Res: Atmospheres.](#) — 1990. — Vol. 95, no. D8. — P. 11717–11728.
340. Discrete angle radiative transfer III: Numerical results and meteorological applications / A. Davis, P.M. Gabriel, S.M. Lovejoy et al. // [J Geophys Res: Atmospheres.](#) — 1990. — Vol. 95, no. D8. — P. 11729–11742.

341. Effective radiative properties of bounded cascade absorbing clouds: Definition of the equivalent homogeneous cloud approximation / F. Szczap, H. Isaka, M. Saute et al. // *J Geophys Res: Atmospheres*. — 2000. — Vol. 105, no. D16. — P. 20617–20633.
342. Effective radiative properties of bounded cascade absorbing clouds: Definition of an effective single-scattering albedo / F. Szczap, H. Isaka, M. Saute et al. // *J Geophys Res: Atmospheres*. — 2000. — Vol. 105, no. D16. — P. 20635–20648.
343. Сушкевич Т.А. Математические модели переноса излучения. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2005. — ISBN: [5-94774-346-9](#).
344. Kuščer I., Ribarič M. Matrix Formalism in the Theory of Diffusion of Light // *Optica Acta*. — 1959. — Vol. 6. — P. 42–51.
345. Устинов Е.А. Метод сферических гармоник: приложение к расчету поляризованного излучения в вертикально-неоднородной планетной атмосфере. Математический аппарат // *Космические исследования*. — 1988. — Т. 26. — С. 550–562.
346. Hovenier J.W., Vander Mee C., Domke H. Transfer of polarized light in planetary atmospheres. Basic concepts and practical methods. — Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2004.
347. Polonsky I.N., Box M.A., Vogt M. Generalized Spherical Harmonic Approximation to Polarized Radiative Transfer. Computational aspects // Preprint submitted to Elsevier Science. — 2006. — P. 1–38. — Access mode: http://www.phys.unsw.edu.au/downloads/share/atmos/gsha_polarn.pdf.
348. Budak V.P., Korkin S.V. The aerosol influence upon the polarization state of the atmosphere solar radiation // *Int J Remote Sensing*. — 2008. — Vol. 29, no. 9. — P. 2469–2506.
349. Siewert C.E. On the equation of transfer relevant to the scattering of polarized light // *Astrophys J*. — 1981. — Vol. 245. — P. 1080–1086.
350. Siewert C.E. On the phase matrix basic to the scattering of polarized light // *Astron Astrophys*. — 1982. — Vol. 109. — P. 195–200.
351. Hovenier J.W., van der Mee C.V.M. Fundamental relationships relevant to the transfer of polarized light in a scattering atmosphere // *Astron Astrophys*. — 1983. — Vol. 128. — P. 1–16.
352. Mishchenko M.I., Travis L.D., Lacis A.A. Scattering, Absorption and Emission of Light by Small Particles. — Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
353. Mishchenko M.I., Travis L.D., Lacis A.A. Multiple Scattering of Light by Particles: Radiative Transfer and Coherent Backscattering. — Cambridge: Cambridge University Press, 2006.

354. Spurr R.J.D. VLIDORT: A linearized pseudo-spherical vector discrete ordinate radiative transfer code for forward model and retrieval studies in multilayer multiple scattering media // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2006. — Vol. 102, no. 2. — P. 316–342.
355. Horváth Ákos, Davies Roger. Anisotropy of water cloud reflectance: A comparison of measurements and 1D theory // [Geophys Res Lett](#). — 2004. — Vol. 31, no. 1. — P. L01102(1–4).
356. Varnai T., Marshak A. Global CALIPSO Observations of Aerosol Changes Near Clouds // [Geoscience and Remote Sensing Letters, IEEE](#). — 2011. — Jan. — Vol. 8, no. 1. — P. 19–23.
357. Martin W., Cairns B., G Bal. Adjoint methods for adjusting three-dimensional atmosphere and surface properties to fit multi-angle/multi-pixel polarimetric measurements // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2014. — Vol. 144. — P. 68–85.
358. Lathrop K.D. Ray Effects in Discrete Ordinates Equations // *Nucl Sci Eng.* — 1968. — Vol. 32, no. 3. — P. 357–369.
359. Chai J.C., Lee H.S., Patankar S.V. Ray effect and false scattering in the discrete ordinates method // [Numer Heat Transfer, Part B: Fundamentals](#). — 1993. — Vol. 24, no. 4. — P. 373–389.
360. Coelho P.J. The role of ray effects and false scattering on the accuracy of the standard and modified discrete ordinates methods // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2002. — Vol. 73, no. 2-5. — P. 231–238. — Third International Symposium on Radiative Transfer.
361. Li H.S. Reduction of false scattering in arbitrarily specified discrete directions of the discrete ordinates method // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2004. — Vol. 86, no. 2. — P. 215–222.
362. Hanson R. A numerical method for solving Fredholm integral equations of the first kind using singular values // [SIAM Journal on Numerical Analysis](#). — 1971. — Vol. 8, no. 3. — P. 616–622.
363. A Limited Memory Algorithm for Bound Constrained Optimization / R. H. Byrd, P. Lu, J. Nocedal, C. Zhu // [SIAM J. Sci. Comput.](#) — 1995. — sep. — Vol. 16, no. 5. — P. 1190–1208.
364. Lourenço H. R., Martin O. C., Stützle T. [Iterated Local Search: Framework and Applications](#) // *Handbook of Metaheuristics*. — Springer Science + Business Media, 2010. — P. 363–397.
365. Goldberg David E. Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning. — 1st edition. — Boston, MA, USA : Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1989.

366. Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. — Cambridge, MA, USA : MIT Press, 1992.
367. Michalewicz Z. [Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs](#). — Springer Science + Business Media, 1996.
368. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines / N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth et al. // [The Journal of Chemical Physics](#). — 1953. — Vol. 21, no. 6. — P. 1087.
369. Kirkpatrick S., Gelatt C. D., Vecchi M. P. Optimization by simulated annealing // *Science*. — 1983. — Vol. 220, no. 4598. — P. 671–680.
370. Cerny V. Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm // [J Optim Theory Appl](#). — 1985. — jan. — Vol. 45, no. 1. — P. 41–51.
371. The GOME-2 total column ozone product: Retrieval algorithm and ground-based validation / D. G. Loyola, M. E. Koukouli, P. Valks et al. // [Journal of Geophysical Research](#). — 2011. — Apr. — Vol. 116, no. D7. — P. D07302–(1–11).
372. Катаев М.Ю., Лукъянов А.К. Метод эмпирических ортогональных функций в задаче восстановления общего содержания CO₂ по данным спутникового Фурье-спектрометра GOSAT // *Вестник Волгоградского гос. университета*. — 2013. — Т. 19, № 2. — С. 99–105.
373. Optimal eigenanalysis for the treatment of aerosols in the retrieval of atmospheric composition from transmission measurements / Y.M. Timofeyev, A.V. Polyakov, H.M. Steele, M.J. Newchurch // [Applied Optics](#). — 2003. — may. — Vol. 42, no. 15. — P. 2635.
374. A fast and sensitive new satellite SO₂ retrieval algorithm based on principal component analysis: Application to the ozone monitoring instrument / Can Li, Joanna Joiner, Nickolay A. Krotkov, Pawan K. Bhartia // [Geophysical Research Letters](#). — 2013. — Vol. 40, no. 23. — P. 6314–6318.
375. Direct retrieval of sulfur dioxide amount and altitude from spaceborne hyperspectral UV measurements: Theory and application / Kai Yang, Xiong Liu, Pawan K. Bhartia et al. // [Journal of Geophysical Research: Atmospheres](#). — 2010. — Vol. 115, no. D2. — P. D00L09(1–28).
376. Wilks D. *Statistical Methods in the Atmospheric Sciences*, 3rd Edition. — New York: Elsevier, 2011.
377. Loyola D. G., Pedergrana M., Gimeno Garcia S. Smart sampling and incremental function learning for very large high dimensional data // [Neural Networks, in press](#). — 2015. — sep.

378. Hughes G. On the mean accuracy of statistical pattern recognizers // [IEEE Trans. Inform. Theory](#). — 1968. — jan. — Vol. 14, no. 1. — P. 55–63.
379. Raviv Y., Intrator N. Bootstrapping with Noise: An Effective Regularization Technique // [Connection Science](#). — 1996. — Vol. 8, no. 3-4. — P. 355–372.
380. Loyola Diego G.R. Applications of neural network methods to the processing of earth observation satellite data // [Neural Networks](#). — 2006. — mar. — Vol. 19, no. 2. — P. 168–177.
381. Blackwell W.J., Chen F.W. *Neural Networks in Atmospheric Remote Sensing*. — Lexington, 2009.
382. Maitra S., Yan J. Principle Component Analysis and Partial Least Squares: Two Dimension Reduction Techniques for Regression // *Applying Multivariate Statistical Models* / Ed. by J.T. Benson, A.M. Conway. — Casualty Actuarial Society, Discussion Paper Program, Canada, 2008. — P. 79–90. — Access mode: <https://www.casact.org/pubs/dpp/dpp08/08dpp76.pdf>.
383. Hotelling H. The most predictable criterion // [Journal of Educational Psychology](#). — 1935. — Vol. 26. — P. 139–142.
384. Hardoon D.R., Szedmak S., Shawe-Taylor J. Canonical Correlation Analysis: An Overview with Application to Learning Methods // [Neural Computation](#). — 2004. — dec. — Vol. 16, no. 12. — P. 2639–2664.
385. Halton J. H. Algorithm 247: Radical-inverse Quasi-random Point Sequence // [Commun ACM](#). — 1964. — Vol. 7, no. 12. — P. 701–702.
386. Comparison of pure and “Latinized” centroidal Voronoi tessellation against various other statistical sampling methods / Vicente J. Romero, John V. Burkardt, Max D. Gunzburger, Janet S. Peterson // [Reliability Engineering & System Safety](#). — 2006. — oct. — Vol. 91, no. 10-11. — P. 1266–1280.
387. Loyola D. G., Pederagnana M., Gimeno Garcia S. Smart sampling and incremental function learning for very large high dimensional data // [Neural Networks](#). — 2016. — jun. — Vol. 78. — P. 75–87.
388. Retrievals of sulfur dioxide from the Global Ozone Monitoring Experiment 2 (GOME-2) using an optimal estimation approach: Algorithm and initial validation / C. R. Nowlan, X. Liu, K. Chance et al. // [Journal of Geophysical Research](#). — 2011. — sep. — Vol. 116, no. D18.

389. Retrieval of stratospheric and tropospheric BrO columns from multi-axis DOAS measurements at Reunion Island (21degrees S, 56 degrees E) / N. Theys, M. Van Roozendaal, F. Hendrick et al. // [Atmos Chem Phys](#). — 2007. — Vol. 7, no. 18. — P. 4733–4749.
390. McCulloch W.S., Pitts W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity // [Bulletin of Mathematical Biophysics](#). — 1943. — dec. — Vol. 5, no. 4. — P. 115–133.
391. Rosenblatt F. The perceptron: A probabilistic model for information storage and organization in the brain. // [Psychological Review](#). — 1958. — Vol. 65, no. 6. — P. 386–408.
392. Горбань А.Н. Обобщенная аппроксимационная теорема и вычислительные возможности нейронных сетей // Сибирский журнал вычислительной математики. — 1998. — Т. 1, № 1. — С. 11–24.
393. Levenberg K. A Method for the Solution of Certain Non-Linear Problems in Least Squares // [Quarterly of Applied Mathematics](#). — 1944. — Vol. 2. — P. 164–168.
394. Marquardt D.W. An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters // [Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics](#). — 1963. — jun. — Vol. 11, no. 2. — P. 431–441.
395. Using CATS near-real-time lidar observations to monitor and constrain volcanic sulfur dioxide (SO₂) forecasts / E. J. Hughes, J. Yorks, N. A. Krotkov et al. // [Geophysical Research Letters](#). — 2016. — Vol. 43, no. 20. — P. 11089–11097. — 2016GL070119.
396. The 2011 Nabro eruption, a SO₂ plume height analysis using IASI measurements / L. Clarisse, P.-F. Coheur, N. Theys et al. // [Atmospheric Chemistry and Physics](#). — 2014. — mar. — Vol. 14, no. 6. — P. 3095–3111.
397. Eruptions of Eyjafjallajökull Volcano, Iceland / Magnús T. Gudmundsson, Rikke Pedersen, Kristín Vogfjörð et al. // [Eos, Transactions American Geophysical Union](#). — 2010. — Vol. 91, no. 21. — P. 190–191.
398. Determination of time- and height-resolved volcanic ash emissions and their use for quantitative ash dispersion modeling: the 2010 Eyjafjallajökull eruption / A. Stohl, A. J. Prata, S. Eckhardt et al. // [Atmospheric Chemistry and Physics](#). — 2011. — may. — Vol. 11, no. 9. — P. 4333–4351.
399. Flemming J., Inness A. Volcanic sulfur dioxide plume forecasts based on UV satellite retrievals for the 2011 Grimsvotn and the 2010 Eyjafjallajokull eruption // [Journal of Geophysical Research: Atmospheres](#). — 2013. — Vol. 118, no. 17. — P. 10,172–10,189.
400. Kokhanovsky Alexander A. [Cloud Optics](#). — Springer Netherlands, 2006.

401. Лубенченко А.В. Теория отражения излучения средами с анизотропным законом рассеяния на основе принципов инвариантности: Диссертация на соискание ученой степени д-ра тех. наук; Московский энергетический институт (Технический университет). — Москва, 2006.
402. Salvat F., Jablonski A., Powell C.J. ELSEPA – Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules // [Comp Phys Comm](#). — 2005. — Vol. 165, no. 2. — P. 157–190.
403. Tanuma S., Powell C.J., Penn D.R. Calculation of electron inelastic mean free paths (IMFPs) VII. Reliability of the TPP-2M IMFP predictive equation // [Surf Interface Anal](#). — 2003. — Vol. 35, no. 3. — P. 268–275.
404. Jablonski A. Determination of the electron inelastic mean free path in solids from the elastic electron backscattering intensity // [Surf Interface Anal](#). — 2005. — Vol. 37, no. 11. — P. 1035–1044.
405. Graat Peter C.J., Somers Marcel A.J., Böttger Amarante. Generalization of the tougaard method for inelastic-background estimation in electron spectroscopy: Incorporation of a depth-dependent inelastic mean free path // [Surf Interface Anal](#). — 1995. — Vol. 23, no. 1. — P. 44–49.
406. Ефременко Д.С. Решение обратных задач теории переноса частиц и излучения для исследования многослойных структур: диссертация на соискание ученой степени к-та физ.-мат. наук; Московский энергетический институт (Технический университет). — Москва, 2011.
407. Angular-resolved elastic peak electron spectroscopy: experiment and Monte Carlo calculations / J. Zemek, P. Jiricek, W. S. M. Werner et al. // [Surf Interface Anal](#). — 2006. — Vol. 38, no. 4. — P. 615–619.
408. Linearized T-matrix and Mie scattering computations / R. Spurr, J. Wang, J. Zeng, M.I. Mishchenko // [J Quant Spectrosc Radiat Transfer](#). — 2012. — Vol. 113, no. 6. — P. 425–439.
409. Ascher U. M., Petzold L.R. Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations. — SIAM, Philadelphia, 1998.
410. Пронин В.П. Упругое и неупругое взаимодействие электронов средних энергий с поверхностью твердого тела: Диссертация на соискание ученой степени д. ф.-м. н. — Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, 2014.

411. Lee B.-G., Lyche T., Morken K. Some examples of quasi-interpolants constructed from local spline projectors. In: Mathematical Methods for Curves and Surfaces / Ed. by T. Lyche, L.L. Schumaker. — Oslo 2000, Vanderbilt Univ. Press, Nashville, TN (2001). — P. 243–252.
412. Петрусов А.С. Разностные схемы и их анализ: Учебно-методическое пособие для студентов V курса Кафедры физики и химии плазмы ФМБФ МФТИ по лекционному курсу «Численное моделирование плазмохимических процессов». — МФТИ, 2004.
413. Scikit-learn: Machine Learning in Python / F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort et al. // Journal of Machine Learning Research. — 2011. — Vol. 12. — P. 2825–2830.
414. MacArthur Robert H. On the relative abundance of bird species // Proc Natl Acad Sci USA. — 1957. — Vol. 43, no. 3. — P. 293–295. — Access mode: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC528435/>.
415. Lichtert S., Verbeeck J. Statistical consequences of applying a PCA noise filter on EELS spectrum images // [Ultramicroscopy](#). — 2013. — Vol. 125. — P. 35–42.